



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA DA BAÍA DE VITÓRIA, ES

Franciane Entringer Curbani

Vitória

2016

Franciane Entringer Curbani

MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA DA BAÍA DE VITÓRIA, ES

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Ambiental da Universidade
Federal do Espírito Santo.

Área de Concentração: Recursos Hídricos

Orientador: Julio Tomás Aquije
Chacaltana

Vitória

2016

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial Tecnológica,
Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

C975m Curbani, Franciane Entringer, 1986-
Modelagem da qualidade da água da Baía de Vitória, ES /
Franciane Entringer Curbani. – 2016.
130 f. : il.

Orientador: Julio Tomás Aquije Chacaltana.
Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) –
Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Estuários. 2. Hidrodinâmica. 3. Água – Oxigênio dissolvido.
4. Água – Qualidade. 5. Vitória, Baía de (ES). 6. Modelagem
numérica. 7. Modelagem computacional. I. Chacaltana, Julio
Tomás Aquije. II. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro
Tecnológico. III. Título.

CDU: 628

Franciane Entringer Curbani

MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA DA BAÍA DE VITÓRIA, ES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Ciências em Engenharia Ambiental na Área de Concentração Recursos Hídricos.

Aprovada em 12 de julho de 2016.

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana
Universidade Federal do Espírito Santo
Orientador

Prof. Dr. José Antonio Tosta dos Reis
Universidade Federal do Espírito Santo
Examinador Interno

Prof. Dr. Gilberto Fonseca Barroso
Universidade Federal do Espírito Santo
Examinador Externo

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, professor Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana, pelos ensinamentos, incentivo e amizade ao longo de anos de orientação.

A minha família, por todo amor e apoio, em especial, a minha mãe Maria Helena, ao meu pai Ivanildo (*in memoriam*), aos meus irmãos Flávio e Felipe, e ao Kaio.

Ao professor Dr. José Antonio Tosta dos Reis, membro da banca examinadora, pelas sugestões e críticas enriquecedoras deste trabalho, e pelas valiosas orientações fornecidas ao longo de sua execução.

Ao professor Dr. Gilberto Fonseca Barroso, pelo aceite em compor a banca examinadora e pelas importantes contribuições para este trabalho.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da UFES, ao Coordenador, prof. Dr. Edmilson Costa Teixeira, e a Secretária, Rose Leão.

A Agência Estadual de Recursos Hídricos (AGERH) e ao Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA), pela disponibilização de dados essenciais à realização deste estudo.

A CAPES, pela concessão de bolsa de estudo.

Agradeço a todos pesquisadores do Laboratório de Simulação de Escoamento com Superfície Livre (LABESUL), especialmente ao prof. Dr. Julio T. A. Chacaltana, Kaio C. Lacerda, Fábio P. Piccoli, Gregório Luiz G. Teixeira, Fernando Túlio C. Barreto e Leonardo C. de Jesus, que formaram a base essencial ao meu desenvolvimento acadêmico e também me propiciaram grande crescimento pessoal ao longo de seis anos de convivência, companheirismo, respeito e amizade: “*If I seen further, it is by standing upon the shoulders of giants*” (Isaac Newton, 1675).

*"Nobody knows where you are
How near or how far
Shine on, you crazy diamond"
Pink Floyd*

RESUMO

A qualidade da água é resultante de condições naturais e do uso e ocupação do solo na bacia hidrográfica. Entre os principais problemas de qualidade da água dos estuários, está a depleção de oxigênio dissolvido devido à entrada excessiva de nutrientes provenientes de efluentes domésticos ou industriais. Estudos da qualidade da água que exigem o entendimento dos processos que ocorrem no corpo hídrico requerem maior abrangência de análise espaço-temporal para evidenciar relações de causa e efeito, sendo os modelos numéricos importantes ferramentas para tal análise. Neste trabalho, foi implantado um modelo numérico para o Sistema Estuarino da Ilha de Vitória (ES, Brasil), com o objetivo de avaliar os processos físicos e bioquímicos que regem a qualidade da água e sua relação com as forçantes hidrodinâmicas, sob os princípios da mecânica dos fluidos computacional. Foram analisados os constituintes NH_4^+ , NH_3 , NO_3^- , DBO5 e OD, que participam do balanço de oxigênio dissolvido, e os processos de nitrificação, mineralização e reaeração, sendo avaliado: a adição ou remoção dos constituintes pelos processos; o efeito das fontes pontuais urbanas no balanço de oxigênio dissolvido; a distribuição espacial das concentrações dos constituintes em instantes de maior e menor diluição, correlacionando-os às forçantes que configuraram tais cenários. A reaeração foi um importante processo de introdução de OD na Baía de Vitória, sendo até 53% do OD atribuído a este processo na região média estuarina. O principal processo de perda de OD foi a mineralização, seguido da nitrificação. A redução da concentração de OD devido às fontes pontuais foi pouco significativa (máxima local de -2,1%). Foi observado durante a sizígia um aumento dos níveis de OD em relação à quadratura, associado ao aumento da diluição dos constituintes na baía, favorecida pelo maior volume de água e pelas maiores velocidades das correntes durante a sizígia. Os momentos críticos para a concentração dos constituintes ocorreram em instantes de estofa de vazante durante marés de quadratura, com menor diluição associada à diminuição da velocidade das correntes na quadratura e menor volume de água proveniente da Baía do ES. Nas regiões próximas ao rio Itanguá e Canal da Costa foi observada uma maior deterioração da qualidade da água, sendo a região média do estuário a mais afetada pelos aportes de nutrientes e DBO considerados.

Palavras-chave: estuário, modelagem computacional, Delft3D, modelagem da qualidade da água.

ABSTRACT

Water quality is the result of natural conditions and the land use in the drainage basin. The depletion of dissolved oxygen (DO) due to excessive input of nutrients from domestic or industrial effluents is one of the most important issues in estuarine water quality. Water quality studies that require an understanding of the processes that occur in the water body requires a comprehensive spatio-temporal analysis to identify cause and effect relationship, therefore numerical models are important tools for such analyzes. In this work a numerical model, based on computational fluid mechanics and transport phenomena, was applied to understand physical and biochemical process governing the water quality of the Vitória Island Estuarine System (ES, Brazil). The following constituents were analyzed: NH_4^+ , NH_3 , NO_3^- , BOD5 and DO. These constituents participate in the DO balance. In addition, nitrification, mineralization and reaeration processes were also analyzed. Based on these constituents and processes the following aspects were evaluated: the addition or removal of the constituents by each process; the effect of punctual urban sources in the DO balance and the spatial distribution of the constituents concentrations in moments of maximum and minimum dilution, correlating them to the hydrodynamic fields. The reaeration was an important process for introducing DO in Vitória Bay, responsible for up to 53% of DO in the middle estuary. The primary loss process of DO was the mineralization, followed by the nitrification. The reduction of DO concentration due to punctual urban sources was minimal (local maximum of -2.1%). The DO concentration at the spring tide was higher than at the neap tide, which was associated with higher dilution of the constituents in the bay during spring tides, due to the larger volume of water and the higher currents velocities. The critical instants for the concentration of the constituents occurred in ebb low water during neap tides, with lower dilution related to weak currents and lower volume of water from the Espírito Santo Bay. At the region of the Itanguá River and Costa Channel it was observed increased deterioration of water quality, and the middle estuary was the most affected area by the considered inputs of nutrient and BOD.

Keywords: estuary, computational modelling, Delft3D, water quality modelling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Composição média do N nos estuários. Fonte: Berman e Bronk (2003) <i>apud</i> Bianchi (2007). Modificado.....	28
Figura 2: Principais processos envolvidos no ciclo biogeoquímico do N nos estuários. (1) fixação biológica do N_2 ; (2) assimilação da amônia; (3) nitrificação; (4) redução assimilatória do NO_3^- ; (5) amonificação ou remineralização do N; (6) oxidação do NH_4^+ ; (7) desnitrificação ou redução dissimilatória do NO_3^- ; e (8) assimilação do NOD. Fonte: Bianchi (2007). Modificado de Libes (1992).	28
Figura 3: Localização da área de estudo.....	48
Figura 4: Sistema de grades aninhadas utilizado na modelagem hidrodinâmica.	58
Figura 5: Grade computacional do domínio SEIV sobreposta à batimetria.	58
Figura 6: Modelo digital de terreno da região de estudo. Fonte: Nascimento (2013).....	61
Figura 7: Batimetria dos canais de acesso ao Porto de Vitória e ao Porto de Tubarão.	61
Figura 8: Médias das vazões diárias do Rio Santa Maria da Vitória para o período de maio a junho de 2013 medidas na estação Santa Leopoldina.	64
Figura 9: Visão geral dos constituintes incluídos no módulo D-Water Quality do modelo Delft3D. Os constituintes são apresentados em grupos funcionais em cinza e as principais relações são indicadas pelas setas; algumas estão omitidas. Siglas: BOD – demanda bioquímica de oxigênio; COD – demanda química de oxigênio; PO – orgânico(a) particulado(a); DO - orgânico(a) dissolvido(a); TIC - carbono inorgânico total; IM – matéria inorgânica suspensa (frações 1, 2 e 3); AAP – fosfato adsorvido; VIVP – fósforo como vivianita; APATP – fósforo como apatita; OPAL – sílica opalina; SUD – sulfeto dissolvido; SUP – sulfeto precipitado; Atr – atrazina; BaP - benzo-a-pireno; Diu – diuron; Flu – fluoranteno; HCB – hexaclorobenzeno; HCH – hexacloroetano; PCB – bifenilas policloradas; OMP – micro-poluentes orgânicos (geral); EnCoc – Enterococos; EColi – <i>Escherichia coli</i> ; FColi – coliformes fecais; TColi – coliformes totais. Fonte: Modificado de Deltares (2014b)	67
Figura 10: Localização dos pontos de coleta de dados de qualidade da água da Baía de Vitória (P-01 a P-23) e dos tributários: rio Santa Maria da Vitória, rio Bubu, rio Itanguá, rio Aribiri e rio Marinho.....	73
Figura 11: Localização das fontes extraídas de Cassini (2011): (1) Canal afluente à Baía de Vitória; (2) Canal dos Escravos; (3) Galerias da região interna da Baía de Vitória; (4) Galeria da rua Duarte Ferreira; (5) Galeria da Av. Paulino Muller; (6) Galeria da EBAP da CESAN;	

(7) Canal da Costa.	74
Figura 12: Séries temporais de elevação e de magnitude das correntes medidas (vermelho) e modeladas (preto).	79
Figura 13: Salinidade medida (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE entre média de superfície-fundo e salinidade modelada 2DH = 1,366. MAPE = 4,35%.	81
Figura 14: Temperatura medida (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE entre média de superfície-fundo e temperatura modelada 2DH = 0,476° C. MAPE = 1,96%.	81
Figura 15: Oxigênio dissolvido medido (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelado para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE para média de superfície-fundo e oxigênio dissolvido modelado 2DH = 1,03 mg O ₂ /L; MAPE = 15,9%.	82
Figura 16: Nitrogênio amoniacal medido (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelado para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE para média de superfície-fundo e nitrogênio amoniacal modelado 2DH = 0,120 mg N/L; MAPE = 30,7%. ..	84
Figura 17: NO ₃ medido (não detectado em superfície e fundo, <0,3 mg N/L) e modelado para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23.	86
Figura 18: Séries temporais de concentração de OD (mg O ₂ /L) modelado na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); mineralização + nitrificação (verde); reaeração + nitrificação (rosa); mineralização + reaeração (amarelo). O ponto representa o valor da concentração de OD medido (média superfície-fundo).	88
Figura 19: Séries temporais de concentração de OD (mg O ₂ /L) modelado na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); mineralização + nitrificação (verde); reaeração + nitrificação (rosa); mineralização + reaeração (amarelo). O ponto representa o valor da concentração de OD medido (média superfície-fundo).	88
Figura 20: Séries temporais de concentração de OD (mg O ₂ /L) modelado na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); mineralização + nitrificação (verde); reaeração + nitrificação (rosa); mineralização + reaeração (amarelo). O ponto representa o valor da concentração de OD medido (média superfície-fundo).	89
Figura 21: Séries temporais de concentração de DBO ₅ (mg O ₂ /L) modelada na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração +	

mineralização + nitrificação (preto); reaeração + nitrificação (cinza).	90
Figura 22: Séries temporais de concentração de DBO ₅ (mg O ₂ /L) modelada na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + nitrificação (cinza).	90
Figura 23: Séries temporais de concentração de DBO ₅ (mg O ₂ /L) modelada na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + nitrificação (cinza).	90
Figura 24: Séries temporais de concentração de NH ₄ ⁺ (mg N/L) modelado na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).	91
Figura 25: Séries temporais de concentração de NH ₄ ⁺ (mg N/L) modelado na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).	92
Figura 26: Séries temporais de concentração de NH ₄ ⁺ (mg N/L) modelado na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).	92
Figura 27: Séries temporais de concentração de NO ₃ ⁻ (mg N/L) modelado na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).	93
Figura 28: Séries temporais de concentração de NO ₃ ⁻ (mg N/L) modelado na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).	93
Figura 29: Séries temporais de concentração de NO ₃ ⁻ (mg N/L) modelado na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).	93
Figura 30: Concentração de OD (mg O ₂ /L) modelada com e sem fontes pontuais para os pontos de observação próximos aos lançamentos.	95
Figura 31: Concentração de OD (mg O ₂ /L) modelada em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).	97
Figura 32: Saturação de O ₂ (%) e constante da taxa de reaeração <i>R</i> _{crear} (1/d) no instante de máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).	98

Figura 33: Momento crítico para a concentração de OD (mg O ₂ /L) modelado ocorrente na estofa da vazante da maré de quadratura (16:00h UTC – 17/06/2013).	99
Figura 34: Concentração de DBO ₅ (mg O ₂ /L) modelada em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).	100
Figura 35: Momento crítico para a concentração de DBO ₅ (mg O ₂ /L) modelada ocorrente na estofa da vazante da maré de quadratura (08:30h UTC – 30/06/2013).	101
Figura 36: Concentração de NH ₄ ⁺ (mg N/L) modelado em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).	103
Figura 37: Concentração de NH ₃ (mg N/L) modelada em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).	104
Figura 38: Momento crítico para a concentração de NH ₄ ⁺ (mg N/L) modelado ocorrente após estofa da vazante da maré de quadratura (22:45h UTC – 17/06/2013).	106
Figura 39: Momento crítico para a concentração de NH ₃ (mg N/L) modelada ocorrente após estofa da vazante da maré de quadratura (00:00h UTC – 18/06/2013).	106
Figura 40: Concentração de NO ₃ ⁻ (mg N/L) modelado em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).	109
Figura 41: Momento crítico para a concentração de NO ₃ ⁻ (mg N/L) modelado ocorrente após estofa da vazante da maré de quadratura (09:10h – 30/06/2013).	110

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Análises de sensibilidade para coeficientes estuarinos. Fonte: James (1993).....	35
Tabela 2: Alguns dos modelos de qualidade da água mais utilizados e suas principais características. Fonte: Modificado de Fitzpatrick e Imhoff (2001) <i>apud</i> Pereira (2004).	42
Tabela 3: Números de Stanton e de Dalton encontrados na literatura por Twigt (2006).	55
Tabela 4: Características do sistema de grades aninhadas utilizado.	59
Tabela 5: Vazões médias dos pequenos tributários da Baía de Vitória. Os valores foram obtidos ao longo de um ciclo de maré de sizígia.	64
Tabela 6: Datas de aquisição de dados de qualidade da água da Baía de Vitória.	72
Tabela 7: Datas de aquisição de dados de qualidade da água dos tributários: rio Santa Maria da Vitória (SMV1C020), rio Bubu (BUB1C010), rio Itanguá (ITG1C002), rio Aribiri (ARI1C001) e rio Marinho (MAR1C020).....	73
Tabela 8: Cargas de DBO e N-amoniacal estimadas por Moraes (2008) e Cassini (2011) para fontes pontuais urbanas.	75
Tabela 9: Variáveis de estado e coeficientes dos processos utilizados no módulo D-Water Quality.	76
Tabela 10: Condições Iniciais dos constituintes para a modelagem da qualidade da água.....	77
Tabela 11: Condições de Contorno para os constituintes na modelagem da qualidade da água.	77
Tabela 12: Concentração de oxigênio dissolvido observada (média de superfície-fundo) e concentração de oxigênio dissolvido modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23; erro absoluto médio (MAE) e erro percentual absoluto médio (MAPE) entre valor observado e modelado.	83
Tabela 13: Concentração de nitrogênio amoniacal observada (média de superfície-fundo) e concentração de nitrogênio amoniacal modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23; erro absoluto médio (MAE) e erro percentual absoluto médio (MAPE) entre valor observado e modelado.	85
Tabela 14: Análises de sensibilidade da concentração dos constituintes para os processos considerados.	94
Tabela 15: Percentual local de redução de oxigênio dissolvido devido às fontes pontuais da Baía de Vitória.....	96

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AGERH	Agência Estadual de Recursos Hídricos
ADI	Método numérico implícito de direção alternada
ANA	Agência Nacional de Águas
CESAN	Companhia Espírito Santense de Saneamento
CONAMA	Conselho Nacional de Meio Ambiente
DHN	Diretoria de Hidrografia e Navegação da Marinha do Brasil
HLES	<i>Horizontal Large Eddy Simulation</i>
HYCOM	<i>HYbrid Coordinate Ocean Model</i>
IEMA	Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia
LABESUL	Laboratório de Simulação de Escoamento com Superfície Livre
NCEP	<i>National Centers for Environmental Prediction</i>
NCODA	<i>Navy Coupled Ocean Data Assimilation</i>
SEIV	Sistema Estuarino da Ilha de Vitória

LISTA DE SÍMBOLOS

NH_4^+	Íon amônio
NH_3	Amônia livre
NO_3^-	Nitrato
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio
DBO5	Demanda Bioquímica de Oxigênio medida a 5 dias e a 20°C
OD	Oxigênio dissolvido
N	Nitrogênio
N_2	Gás nitrogênio
NID	Nitrogênio inorgânico dissolvido
NOD	Nitrogênio orgânico dissolvido
NDT	Nitrogênio dissolvido total
NOP	Nitrogênio orgânico particulado
O_2	Gás oxigênio
NO	Óxido nítrico
N_2O	Óxido nitroso
CO_2	Gás carbônico
H_2O	Água
NO_2^-	Nitrito
P	Pressão hidrostática
σ	Coordenada vertical do tipo σ
g	Aceleração da gravidade
ρ	Massa específica
H	Profundidade total
P_{atm}	Pressão atmosférica
P_u	Componente x do gradiente de pressão
P_v	Componente y do gradiente de pressão
t	Tempo
x, y, z	Coordenadas cartesianas
u	Componente x da velocidade
v	Componente y da velocidade
ω	Componente z da velocidade

ζ	Elevação da superfície livre cima do nível de referência
d	Profundidade da água abaixo de um plano de referência
f	Parâmetro de Coriolis
ν_v	Viscosidade turbulenta vertical
ν_H	Viscosidade turbulenta horizontal
F_u	Componente x das forças externas
F_v	Componente y das forças externas
q_{in}	Fonte local
q_{out}	Sumidouro local
Pr	Precipitação
E	Evaporação
Q	Fluxo de massa
c	Concentração
S	Termos fonte e sumidouro
D_H	Difusividade horizontal
D_v	Difusividade vertical
c_h	Número de Stanton
c_e	Número de Dalton
τ_{bx}	Componente x da tensão cisalhante de fundo
τ_{by}	Componente y da tensão cisalhante de fundo
R	Invariante de Riemann
U	Velocidade normal ao contorno
η	Elevação da superfície
h	Profundidade a partir do nível médio
r	Índice de correlação de Pearson
MAE	Erro absoluto médio
RMS	Erro Médio Quadrático
Id	Índice de concordância de Wilmott
MAPE	Erro percentual absoluto médio
P_i	Valor modelado
O_i	Valor observado
i	Tempo i
n	Número de dados

M	Massa
$-Rc_{DBO}$	Constante da taxa de mineralização de primeira ordem a 20°C
c_{DBO5}	Concentração de DBO5 carbonácea
ϑ_{DBO}	Coeficiente de temperatura para mineralização
T	Temperatura da água
OD_{DBO}^{Cr}	Concentração crítica de oxigênio dissolvido para a mineralização
OD_{DBO}^{Ot}	Concentração ótima de oxigênio dissolvido para a mineralização
$-Rc_{nit}$	Constante da taxa de nitrificação de primeira ordem a 20°C
NH_4	Concentração de amônio
ϑ_{nit}	Coeficiente de temperatura para nitrificação
O_2	Concentração de oxigênio dissolvido
OD_{nit}^{Cr}	Concentração crítica de oxigênio dissolvido para a nitrificação
OD_{nit}^{Ot}	Concentração ótima de oxigênio dissolvido para a nitrificação
Rc_{rear}	Constante da taxa de reaeração de primeira ordem
OD_{sat}	Concentração de saturação de oxigênio dissolvido
ϑ_{rear}	Coeficiente de temperatura para reaeração
a, b, c, d	Coeficientes da formulação para reaeração
C_{ox}	Concentração atual de oxigênio dissolvido
C_{oxs}	Concentração de saturação de oxigênio dissolvido
f_{sat}	Percentual de saturação
kl_{rear}	Coeficiente de transferência de reaeração na água
kl_{rear}^{20}	Coeficiente de transferência de reaeração na água a 20°C
kt_{rear}	Coeficiente de temperatura para o coeficiente de transferência
Rc_{rear}	Taxa de reaeração
k	Constante da taxa de reação na temperatura T
k^{20}	Constante da taxa na temperatura de referência 20°C
k_T	Coeficiente de temperatura

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
2	OBJETIVOS.....	23
2.1	OBJETIVO GERAL	23
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	23
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	24
3.1	ESTUÁRIOS	24
3.1.1	<i>Aspectos da Dinâmica Física dos Estuários</i>	<i>24</i>
3.1.2	<i>Aspectos da Química das Águas Estuarinas</i>	<i>25</i>
3.1.3	<i>Fontes de Matéria Orgânica para os Estuários.....</i>	<i>26</i>
3.2	FÍSICA E BIOGEOQUÍMICA DOS ESTUÁRIOS.....	26
3.2.1	<i>Ciclo do Nitrogênio</i>	<i>27</i>
3.2.2	<i>Balanco de Oxigênio Dissolvido</i>	<i>30</i>
3.2.2.1	Consumo de Oxigênio.....	31
3.2.2.2	Produção de Oxigênio	33
3.3	FUNDAMENTOS DA MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA EM ESTUÁRIOS	33
3.3.1	<i>Principais Aspectos dos Modelos de Qualidade da Água.....</i>	<i>35</i>
3.3.2	<i>Modelos de Qualidade da Água</i>	<i>37</i>
3.4	MODELO DELFT3D-FLOW E MÓDULO D-WATER QUALITY	43
3.5	ESTUDOS PRETÉRITOS DE MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA NA BAÍA DE VITÓRIA	45
4	METODOLOGIA	48
4.1	ÁREA DE ESTUDO	48
4.2	MODELAGEM HIDRODINÂMICA.....	50
4.2.1	<i>Modelo Delft3D-FLOW.....</i>	<i>50</i>
4.2.1.1	Modelo Matemático do Movimento da Água e do Transporte de Substância e Temperatura	51
4.2.1.2	Modelo de Turbulência	53
4.2.1.3	Modelo de Fluxo de Calor.....	54
4.2.1.4	Condições de Contorno	55

4.2.1.5	Método Numérico	56
4.2.2	<i>Implantação do Modelo Hidrodinâmico</i>	57
4.2.2.1	Sistema de Grades Aninhadas	57
4.2.2.2	Batimetria e Altimetria do Sistema Estuarino da Ilha de Vitória.....	60
4.2.2.3	Rugosidade de Fundo	62
4.2.2.4	Condições Iniciais e Condições de Contorno do Domínio SEIV	62
4.2.3	<i>Verificação da Modelagem Hidrodinâmica</i>	64
4.2.4	<i>Modelagem Hidrodinâmica do SEIV</i>	65
4.3	MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA.....	66
4.3.1	<i>Módulo D-Water Quality (Delft3D)</i>	66
4.3.1.1	Modelo Conceitual e Modelo Matemático.....	66
4.3.1.2	Método Numérico	66
4.3.1.3	Constituintes e Processos Disponíveis	67
4.3.1.4	Tipos de Condições de Contorno	67
4.3.1.5	Balanco de Oxigênio Dissolvido-DBO	68
4.3.1.6	Amônia Livre ou Amônia Não Ionizada (NH ₃)	70
4.3.1.7	Temperatura e Taxas de Reação.....	71
4.3.2	<i>Domínio e Grade Computacional</i>	71
4.3.3	<i>Base de Dados</i>	71
4.3.3.1	Análises Físico-Químicas da Água da Baía de Vitória e de seus Principais Tributários	71
4.3.3.2	Estimativa de Nutrientes provenientes de Fontes Pontuais Urbanas	74
4.3.4	<i>Constituintes e Processos</i>	75
4.3.5	<i>Condições Iniciais e Condições de Contorno</i>	77
4.3.6	<i>Fontes Pontuais</i>	78
4.3.7	<i>Vento</i>	78
4.3.8	<i>Modelagem de Constituintes de Qualidade da Água</i>	78
4.3.9	<i>Verificação da Modelagem da Qualidade da Água</i>	79
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	79
5.1	VERIFICAÇÃO DA MODELAGEM HIDRODINÂMICA	79
5.1.1	<i>Elevação e Correntes</i>	79
5.1.2	<i>Salinidade e Temperatura</i>	80
5.2	VERIFICAÇÃO DA MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA	81

5.2.1	<i>Oxigênio Dissolvido</i>	82
5.2.2	<i>Nitrogênio Amoniacal</i>	84
5.2.3	<i>Nitrato</i>	86
5.3	MODELAGEM DOS PROCESSOS DE QUALIDADE DA ÁGUA	87
5.3.1	<i>Oxigênio Dissolvido</i>	87
5.3.2	<i>Demanda Bioquímica de Oxigênio</i>	89
5.3.3	<i>Nitrogênio Amoniacal</i>	91
5.3.4	<i>Nitrato</i>	92
5.3.5	<i>Síntese do Efeito dos Processos de Qualidade da Água nos Constituintes</i>	94
5.4	EFEITO DAS FONTES PONTUAIS NO OXIGÊNIO DISSOLVIDO.....	94
5.5	DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DOS CONSTITUINTES NA BAÍA DE VITÓRIA ..	96
5.5.1	<i>Oxigênio Dissolvido</i>	97
5.5.2	<i>Demanda Bioquímica de Oxigênio</i>	100
5.5.3	<i>Nitrogênio Amoniacal</i>	102
5.5.4	<i>Nitrato</i>	108
6	CONCLUSÕES	111
7	REFERÊNCIAS	114

1 INTRODUÇÃO

A contaminação dos ecossistemas aquáticos aumenta consideravelmente com o crescimento populacional, o desenvolvimento industrial e a urbanização. Isso ocorre porque a qualidade da água é, de forma geral, resultante de condições naturais e do uso e ocupação do solo na bacia hidrográfica, sendo afetada naturalmente pelo escoamento superficial e infiltração no solo resultantes da precipitação, e pela ação antrópica como o lançamento de efluentes domésticos ou industriais e o uso de fertilizantes e defensivos agrícolas no solo (VON SPERLING, 1996).

A gestão dos recursos hídricos tem o desafio de atender múltiplas demandas de usos da água, como abastecimento, geração de energia e navegação, conciliando-as com o equilíbrio dos ecossistemas aquáticos e a manutenção da biodiversidade. Somado a esses desafios, ainda existe a incerteza a respeito do suprimento natural de água e da demanda futura, considerando modificações climáticas, no padrão de vida da população e nas bacias hidrográficas, o que exige um gerenciamento integrado dos recursos hídricos, com elaboração de planos que permitam uma eficiente avaliação de impactos e proposição de alternativas.

É estimado que no século XX, enquanto a população mundial aumentou aproximadamente três vezes – de 1,8 a 6 bilhões de pessoas – o consumo de água aumentou seis vezes; em contrapartida, a qualidade da água foi severamente deteriorada pela descarga de poluentes (LOUCKS; VAN BEEK, 2005).

Nesse contexto, informações sobre a qualidade da água dos corpos hídricos são importantes para definir e avaliar planos de desenvolvimento e políticas, auxiliando as partes interessadas e tomadores de decisão na busca de soluções para os problemas da gestão da água.

É fundamental o conhecimento sobre a pressão que a poluição da água exerce sobre os estuários, ambientes costeiros de transição entre continente e oceano, considerando a importância ecológica e socioeconômica destes ambientes, pois eles fornecem alimento e habitat a uma gama de organismos com papel determinante na cadeia alimentar marinha, sendo também fonte de recursos alimentares, geração de emprego e renda. O ecossistema manguezal associado a sistemas estuarinos é reconhecido como ecossistema-chave que abriga espécies típicas ou espécies que o habitam em pelo menos parte do seu ciclo de vida, dependentes dele para sua manutenção. Segundo a classificação realizada através do índice de sensibilidade ambiental ESI (*Environmental*

Sensitivity Index), o manguezal é considerado uma das áreas de maior sensibilidade ambiental do mundo no que se refere aos impactos causados por derramamentos de óleo, por exemplo. Em uma faixa de 1 a 10 níveis e sub-níveis que variam de A a E, em ordem crescente de sensibilidade, os manguezais tropicais são classificados como 10-D (NOAA, 2002).

Apesar disso, estuários são comumente receptores de efluentes domésticos ou industriais, que contribuem para a degradação da qualidade de suas águas elevando as concentrações de bactérias, vírus e outros organismos que podem afetar a saúde humana, adicionando matéria orgânica que pode desencadear processos de eutrofização e reduzir os níveis de oxigênio dissolvido a limites fatais para o ecossistema aquático, e inserindo metais pesados tóxicos e outros micro-poluentes bioacumulativos que podem trazer danos aos organismos aquáticos e seus consumidores.

Entre os principais problemas de qualidade da água dos estuários, Lung (1993) reporta a alteração do regime de salinidade local através da diluição pelas descargas de efluentes; a modificação de habitats de organismos bentônicos pelos sólidos suspensos que agem como carreadores de contaminantes; o lançamento de efluentes com organismos patogênicos como bactérias e vírus; a depleção sazonal ou diurna de oxigênio dissolvido perturbando ou deslocando comunidades estuarinas; a entrada excessiva de nutrientes, que pode estimular a superprodução de algumas espécies de algas com florações periódicas, causando flutuação nos níveis de oxigênio dissolvido; e, por fim, as altas concentrações de substâncias tóxicas como amônia, metais e poluentes orgânicos, que podem perturbar e até provocar morte de organismos aquáticos.

Modelos são ferramentas úteis para estudos de qualidade da água, permitindo não apenas a caracterização momentânea e pontual de determinado corpo hídrico, como realizado nas análises *in situ*, mas também o entendimento de diversos processos que nele ocorrem, que requerem maior abrangência de análise espaço-temporal para evidenciar relações de causa e efeito. Permitem avaliar o comportamento dos contaminantes e a influência de fontes poluidoras, estimar o tempo de residência dos poluentes em um corpo d'água e seu período de recuperação, dentre outras aplicações. Jørgensen (1994) ressalta ainda a importância do uso de modelos para o preenchimento de lacunas de informações disponíveis, para a análise de fluxos dentro de diferentes compartimentos e no estudo dos processos que neles ocorrem.

Segundo Wang *et al.* (2013), os modelos de qualidade da água estão submetidos a um longo período de desenvolvimento desde que Streeter e Phelps construíram o primeiro

(modelo S-P), apresentado em Streeter e Phelps (1958), para controlar a poluição do rio Ohio, nos Estados Unidos. Esse progresso passou por modelos que contemplavam apenas poucas variáveis de qualidade da água para modelos que consideram mais variáveis; de modelos estacionários a modelos dinâmicos; de fontes pontuais a modelos de acoplamento de fontes pontuais e não pontuais; de zero-dimensionais a unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais.

Em consonância com tal evolução, este trabalho visa avaliar processos físicos e bioquímicos que regem a qualidade da água da Baía de Vitória (ES, Brasil), pertencente ao Sistema Estuarino da Ilha de Vitória, sob a ótica da mecânica dos fluidos computacional para o estudo da qualidade da água associada à hidrodinâmica, visto que entre os fatores físicos que influenciam a qualidade das águas em regiões costeiras e estuarinas, a hidrodinâmica é um dos preponderantes.

Entre os principais contribuintes para a degradação da qualidade da água da Baía de Vitória está o lançamento de efluentes domésticos e industriais, com contribuição significativa de esgoto *in natura*, sendo o último associado principalmente a vários trechos de ocupação desordenada ao longo das margens da baía e de seus afluentes. Seu maior supridor de água doce, o Rio Santa Maria da Vitória, percorre regiões com intensa atividade agropecuária com o uso de defensivos e fertilizantes agrícolas no solo, barragens e lançamentos de resíduos.

A técnica de modelagem numérica e computacional já foi aplicada no estudo da hidrodinâmica do Sistema Estuarino da Ilha de Vitória (CHACALTANA *et al.*, 2003; RIGO, 2004; GARÇÃO e CHACALTANA, 2009; NASCIMENTO, 2013; entre outros). Os estudos de qualidade da água desse sistema abordaram até o momento análises *in situ*, modelos analíticos e modelos numéricos que consideraram constituintes conservativos ou com taxa de decaimento e lançamento de cargas hipotéticas (CASTRO *et al.*, 2001; GAZE, 2005; SALDANHA, 2007; CASSINI, 2011; e outros), ou seja, não sendo até então realizada modelagem numérica datada contemplando reações e processos físicos, químicos e bioquímicos nas equações que resolvem o balanço de massa, de forma a representar mais fielmente os processos que ocorrem no corpo hídrico. O presente estudo tem como objetivo, portanto, aumentar o conhecimento existente sobre a dinâmica do ambiente estuarino e, sobretudo, contribuir com informações sobre processos que influenciam a qualidade da água, analisando neste estudo os processos de reaeração, nitrificação e mineralização, os quais são importantes na determinação do balanço de oxigênio dissolvido nos estuários.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Contribuir para o conhecimento dos processos físicos e bioquímicos que regem a qualidade da água da Baía de Vitória.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Avaliar a hidrodinâmica do Sistema Estuarino da Ilha de Vitória usando os princípios da Mecânica dos Fluidos Computacional;
- Avaliar a distribuição de temperatura e salinidade na Baía de Vitória;
- Avaliar processos físicos e bioquímicos quanto à adição ou remoção de compostos de nitrogênio, Demanda Bioquímica de Oxigênio e oxigênio dissolvido da Baía de Vitória;
- Avaliar a influência das fontes pontuais urbanas no balanço de oxigênio dissolvido na Baía de Vitória;
- Avaliar a distribuição de compostos de nitrogênio, Demanda Bioquímica de Oxigênio e oxigênio dissolvido usando os princípios de transporte de massa e considerando processos físicos e bioquímicos na Baía de Vitória.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 ESTUÁRIOS

Entre diferentes definições existentes para estuários, Pritchard (1967) os define como corpos de água semifechados com conexão livre com o mar aberto, em que a água do mar é diluída com água doce derivada da drenagem continental. Perillo (1996) complementa a definição incluindo que os estuários são ambientes que podem sustentar espécies biológicas eurialinas em parte ou na totalidade do seu ciclo de vida.

3.1.1 Aspectos da Dinâmica Física dos Estuários

Segundo Bianchi (2007), a circulação é a mais importante característica de um estuário porque determina o fluxo de sal e a dispersão horizontal, sendo a principal variável que afeta a estratificação. Os estuários são tradicionalmente classificados com base nos padrões de circulação, mais especificamente, podem ser divididos de acordo com duas abordagens gerais: controle hidráulico em escoamento de duas camadas (STOMMEL; FARMER, 1953 *apud* BIANCHI, 2007); e mistura espacial como um balanço viscoso-advectivo-difusivo nas camadas estratificadas (PRITCHARD, 1952, 1954, 1956; RATTRAY; HANSEN, 1962; HANSEN; RATTRAY, 1965; FISHER, 1972 *apud* BIANCHI, 2007). De acordo com a estratificação vertical de salinidade, Pritchard (1955) e Cameron e Pritchard (1963) classificam os estuários nos seguintes tipos: (a) cunha salina; que são estuários típicos de regiões de micromaré dominados pela descarga fluvial (b) moderadamente ou parcialmente misturado; (c) verticalmente bem misturado e lateralmente estratificado; (d) bem misturado. Detalhes podem ser encontrados em Miranda *et al.* (2002).

O transporte vertical e a circulação gravitacional nos estuários são influenciados pela estratificação e mistura turbulenta, o que resulta principalmente das forças desestabilizadoras de marés e/ou ventos, e a mistura da água salgada com a água doce ocorre através de processos de mistura e difusão, sendo a difusão turbulenta essencial para os padrões de circulação estuarina (PETERS, 1999; PETERS; BOKHORST, 2000).

As consequências biogeoquímicas destes processos de mistura são importantes no que se refere à distribuição dos constituintes na água determinada pelos processos de

transporte associados à dinâmica local.

3.1.2 Aspectos da Química das Águas Estuarinas

Nos estuários, os constituintes presentes na água podem ser alterados devido a inúmeros processos como transporte, precipitação, evaporação, dissolução e oxidação, sendo verificado, portanto, um comportamento não conservativo, pois podem não estar em constante proporção (BIANCHI, 2007).

A mistura entre a água do rio e água do mar pode ser bastante variada em diferentes sistemas estuarinos, resultando em uma coluna d'água altamente ou fracamente estratificada/misturada (BIANCHI, 2007). Essa mistura e os gradientes de forças iônicas podem afetar significativamente as concentrações dos constituintes dissolvidos e particulados através de processos como adsorção/desorção e floculação, bem como através de processos biológicos (DAY *et al.*, 2013).

O material particulado nos sistemas estuarinos é composto por biodetritos e componentes inorgânicos litogênicos (DAY *et al.*, 2013). As partículas biogênicas são provenientes de pelotas fecais, detritos planctônicos e terrestres, e agregados de materiais biogênicos e litogênicos, enquanto as partículas litogênicas são derivadas do intemperismo de rochas e compreendem principalmente os minerais primários quartzo, feldspato, silicato e compostos hidrogenados formados *in situ* por processos químicos (TURNER; MILLWARD, 2002). O material particulado é primariamente derivado dos rios e sistemas inundados adjacentes, e de eventos de ressuspensão, que são importantes no controle do destino e transporte de constituintes nos estuários (TURNER; MILLWARD, 2002). Algumas das partículas biogênicas são degradadas e convertidas para matéria inorgânica dissolvida (DAY *et al.*, 2013).

Os gases dissolvidos são extremamente importantes em vários ciclos biogeoquímicos dos estuários (BIANCHI, 2007). Simplificadamente, o sentido de troca de gases entre o ar e a água depende de suas concentrações e o equilíbrio é atingido se as concentrações em ambos ambientes são equivalentes, a qual é diretamente proporcional à pressão parcial do gás (lei de Henry). As concentrações normais de equilíbrio atmosféricas são baseadas em condições de balanço entre ar e água a uma particular pressão, temperatura, salinidade e umidade. Entretanto, vários fatores físicos e biológicos fazem com que os gases tenham um comportamento não conservativo, como: a alteração do gás oxigênio (O₂) através da produção pelo fitoplâncton e consumo devido à oxidação

dos compostos de carbono e processo de nitrificação; alteração do gás nitrogênio (N₂) pelas bactérias através dos processos de desnitrificação e fixação; e a alteração do gás carbônico (CO₂) pela produção a partir da decomposição (DAY *et al.*, 2013). Através do ar também ocorre a deposição via precipitação e/ou sedimentação de partículas úmidas ou secas que levam nutrientes e metais contaminantes, podendo esta contribuição ser significativa nos balanços biogeoquímicos dos estuários, por exemplo, no ciclo do nitrogênio (BIANCHI, 2007).

3.1.3 Fontes de Matéria Orgânica para os Estuários

A fixação fotossintética do carbono inorgânico e nutrientes em biomassa vegetal é a fonte primária de matéria orgânica dentro dos estuários. Os *inputs* de matéria orgânica dissolvida (<0,45 μm), matéria orgânica particulada (>0,45 μm) e nutrientes para os estuários podem ocorrer a partir tanto do oceano quanto dos rios (DAY *et al.*, 2013).

A matéria orgânica estuarina é proveniente de uma série de fontes autóctones e alóctones e entre as principais estão os *inputs* fluviais, produção autóctone de algas e plantas vasculares, fluxos bentônicos, águas subterrâneas e trocas com sistemas costeiros adjacentes (BIANCHI, 2007).

A matéria orgânica fluvial/estuarina é de forma geral considerada recalcitrante, sendo transportada de forma conservativa para o oceano; entretanto, a variabilidade espacial fitoplanctônica, a captação pelas bactérias, os processos de remoção química (floculação, adsorção, agregação e precipitação), os aportes a partir da água intersticial durante eventos de ressuspensão e os aportes atmosféricos podem contribuir para o comportamento não conservativo da matéria orgânica nos estuários (BIANCHI, 2007).

3.2 FÍSICA E BIOGEOQUÍMICA DOS ESTUÁRIOS

Os ciclos biogeoquímicos envolvem a interação entre os processos biológicos, químicos e geológicos que determinam fontes, sumidouros e fluxos de elementos entre diferentes reservatórios dentro do ecossistema (BIANCHI, 2007). O acoplamento entre a física e a biogeoquímica estuarina ocorre em várias escalas e variáveis físicas como circulação, descarga fluvial e de águas subterrâneas, inundação de marés, eventos de ressuspensão e interação com sistemas adjacentes constituem importantes forçantes que exercem controle nos ciclos biogeoquímicos estuarinos (BIANCHI, 2007).

3.2.1 Ciclo do Nitrogênio

O nitrogênio elementar (N_2) constitui 80% da atmosfera em forma dominante de gás nitrogênio; entretanto, N_2 é geralmente não reativo, com grande parte desta reserva indisponível aos organismos, sendo necessária fixação em formas iônicas para posterior consumo pelas plantas. Portanto, é usualmente considerado um nutriente limitante em vários ecossistemas, por ser essencial para a síntese de aminoácidos e proteínas e por frequentemente ocorrer em baixas concentrações (BIANCHI, 2007). As formas mais oxidadas e mais reduzidas são NO_3^- (nitrato) e NH_4^+ (amônio), respectivamente.

Os fluxos no ciclo do N nos estuários são geralmente afetados por aportes de N de águas superficiais e subterrâneas, atmosférico (seco e úmido), bem como pela reciclagem do N na coluna d'água e nos sedimentos. Nos estuários, os sistemas de raízes da vegetação de manguezal também são uma importante fonte de N.

O ciclo global de N tem sido seriamente alterado por atividades antrópicas. Os fertilizantes artificiais de N, por exemplo, fazem com que N_2 seja fixado a NH_3 através de processos industriais para compensar sua indisponibilidade nas culturas agrícolas, resultando em um incremento de N nos solos e nas águas residuais que chegam aos rios e estuários, gerando problemas de eutrofização nos ecossistemas aquáticos (BIANCHI, 2007). Kroeze e Seitzinger (1998) estimam que em 2050, 90% do nitrogênio inorgânico dissolvido (NID) exportado pelos rios serão derivados de fontes antropogênicas e, segundo Bianchi (2007), com base nos trabalhos de Nixon (1995), Nixon *et al.* (1996), Boynton e Kemp (2000), Seitzinger *et al.* (2002) e Bouwman *et al.* (2005), a entrada dominante de N total para os estuários também tem se mostrado associada às descargas de água doce a partir dos rios. As fontes de NID, como NO_3^- a NH_4^+ , são tipicamente as formas dominantes de N utilizadas pelo fitoplâncton e outras algas, e praticamente se esgotam durante um evento de floração algal. Modelos de predição de exportação de NID indicam que na América do Sul a exportação pode triplicar devido ao crescimento populacional (SEITZINGER *et al.*, 2002), ocasionando aumento da ocorrência de eutrofização nos estuários. O íon NH_4^+ representa uma grande fração do N total nos estuários devido à ligação mais forte entre sedimento e coluna d'água nesses ambientes em relação aos ambientes de plataforma mais profundos, sendo a forma dominante do NID nos sedimentos.

O nitrogênio orgânico dissolvido (NOD) pode representar uma significativa fração do nitrogênio dissolvido total (NDT) nos estuários, cerca de 60 a 69%, sendo suas fontes

associadas à comunidade planctônica e fontes alóctones como escoamento superficial, detritos de plantas lixiviados, lixiviação do solo e deposição atmosférica, com compostos que incluem uréia, aminoácidos combinados dissolvidos, proteínas, ácidos nucleicos, substâncias húmicas, entre outros (BERMAN, BRONK, 2003).

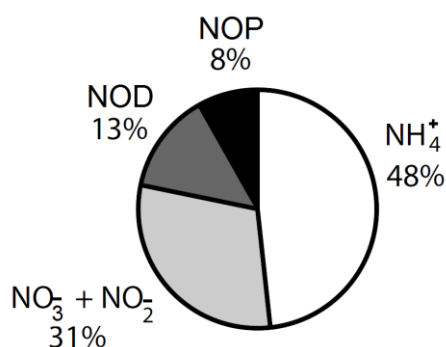


Figura 1: Composição média do N nos estuários. Fonte: Berman e Bronk (2003) *apud* Bianchi (2007). Modificado.

Os principais processos envolvidos no ciclo biogeoquímico do N nos estuários são: fixação biológica do N_2 ; assimilação da amônia; nitrificação; redução assimilatória do NO_3^- a NH_4^+ ; amonificação ou remineralização do N; oxidação do NH_4^+ ; desnitrificação ou redução dissimilatória do NO_3^- ; e assimilação do NOD (DAY *et al.*, 2013) (Figura 2).

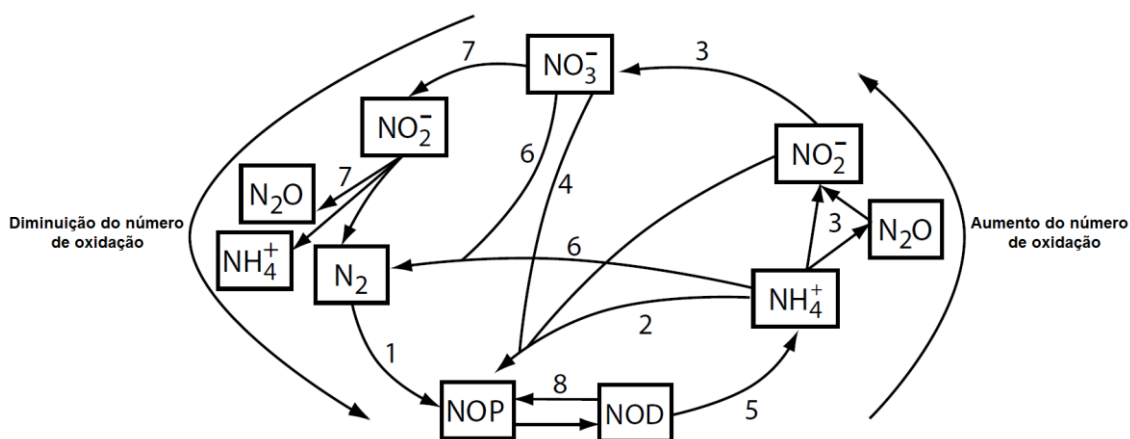


Figura 2: Principais processos envolvidos no ciclo biogeoquímico do N nos estuários. (1) fixação biológica do N_2 ; (2) assimilação da amônia; (3) nitrificação; (4) redução assimilatória do NO_3^- ; (5) amonificação ou remineralização do N; (6) oxidação do NH_4^+ ; (7) desnitrificação ou redução dissimilatória do NO_3^- ; e (8) assimilação do NOD. Fonte: Bianchi (2007). Modificado de Libes (1992).

A fixação biológica do N_2 (FBN) é realizada por organismos procariotas especializados

(diazotróficos) resultando em redução catalisada pelo complexo enzimático nitrogenase do N_2 a NH_3 ou NH_4^+ , ou em compostos de nitrogênio orgânicos. Essa reação é altamente sensível ao O_2 e, conseqüentemente, depende de condições anaeróbias.

A assimilação da amônia ocorre quando NH_3 ou NH_4^+ são captados e incorporados às moléculas orgânicas. A habilidade de utilizar essas formas reduzidas é uma vantagem para os organismos porque é uma forma direta de obter N, ao contrário da utilização de NO_3^- que exige um passo extra de redução (BIANCHI, 2007).

A nitrificação é o processo em que NH_3 ou NH_4^+ é oxidado a NO_2^- e NO_3^- , também mediado por bactérias. O processo requer O_2 e, por isso, a atividade das bactérias nitrificantes é sensível à ausência de oxigênio dissolvido.

A redução assimilatória do NO_3^- a NH_4^+ envolve simultaneamente a redução e do NO_3^- e a captação do N pelo organismo em sua biomassa.

A amonificação é o processo em que NH_3 ou NH_4^+ é produzido durante a decomposição de N orgânico pelos organismos. A forma não ionizada, NH_3 , é reconhecidamente a espécie mais tóxica no ambiente aquático (ERICKSON, 1985).

A oxidação do NH_4^+ envolve a oxidação anaeróbia do NH_4^+ com NO_3^- , podendo ser, segundo Bianchi (2007), outro mecanismo de perda de N em estuários, devido às altas concentrações de NO_3^- e NH_4^+ nesses ambientes.

A desnitrificação ou redução dissimilatória do NO_3^- é a redução deste a qualquer forma gasosa de N como NO, N_2O e N_2 pelos microorganismos. Esse processo representa a maior via de perda de N dos estuários e tem se mostrado proporcional ao tempo de residência, sugerindo que com o aumento do tempo de residência mais N é reciclado na coluna d'água e nos sedimentos, aumentando a desnitrificação (NIXON *et al.*, 1996; BIANCHI, 2007). As taxas de desnitrificação em estuários podem exceder muito as taxas de fixação biológica do N_2 (NIXON *et al.*, 1996), com até 20% do nitrogênio fixado podendo ser perdido (JOYE; PAERL, 1994). Segundo Bianchi (2007), entre os fatores que regulam a desnitrificação nos estuários, também estão as trocas de NH_4^+ entre sedimento e água, a demanda de oxigênio pelo sedimento e entradas externas de N. Bianchi (2007) relata que, em uma pesquisa realizada em 14 sistemas estuarinos, a remoção de N em cerca de 50% destes estuários variaram entre 30% e 60%, considerando a entrada de NID. A perda total de N pela desnitrificação nos estuários varia entre 25 e 40%, sendo este o principal fator contribuinte para a limitação por N, que tipicamente ocorre via consumo de NO_3^- na coluna d'água, bem como do NO_3^- produzido pela nitrificação no sedimento (LAMONTAGNE *et al.*, 2002; BIANCHI,

2007). Segundo Kroeze e Seitzinger (1998), o óxido nitroso (N_2O) é um dos principais gases estufa na atmosfera da Terra, sendo suas concentrações aumentadas ao longo de décadas devido às atividades humanas, o que gera uma preocupação ambiental, visto que ele contribui para o aquecimento global e para a diminuição do ozônio estratosférico. A maior parte do N_2O atmosférico é de origem biogênica, sendo produzido pelas bactérias durante a nitrificação e desnitrificação (BOUWMAN *et al.*, 1995).

A assimilação do NOD envolve a captação e incorporação de formas orgânicas de N, como aminoácidos, à biomassa dos organismos heterotróficos e autotróficos. Os rios podem fornecer até 80% de N em forma de NOD e, após mineralização de uma fração através da atividade microbiana, esta fica disponível para o consumo pelo fitoplâncton (BIANCHI, 2007).

Apenas cerca de 2,8% do N dissolvido proveniente dos rios é diretamente fornecido ao fitoplâncton em águas costeiras, sendo a maioria disponibilizado após reciclagem do N nos estuários. É estimado que 30 a 65% do N total nos estuários é retido ou perdido através do ciclo de reciclagem, reduzindo a entrada deste para a região oceânica costeira (NIXON *et al.*, 1996; BIANCHI, 2007). Portanto, a quantidade de N exportada pelos estuários é menor que a que entra pelos rios, devido aos processos de remoção, que dependem fortemente, dentre outros fatores, da temperatura e da atividade microbiana (KROEZE; SEITZINGER, 1998; BIANCHI, 2007).

Estudos do balanço de nutrientes permitem a comparação entre diferentes estuários com diferentes características, criando uma capacidade de prever o destino e o transporte de nutrientes que entram no sistema. Segundo Bianchi (2007), grande parte dessa pesquisa envolve esforços de modelagem na Europa e na América do Norte, sendo os estuários subtropicais e tropicais ainda pouco estudados, os quais podem apresentar diferentes parâmetros de controle.

3.2.2 Balanço de Oxigênio Dissolvido

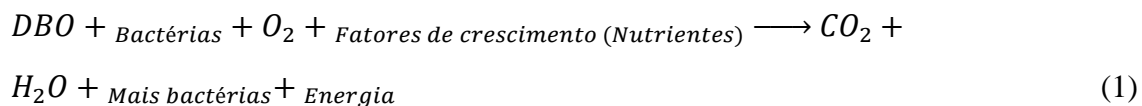
No processo de purificação natural de um corpo hídrico existe um balanço entre o consumo e a produção de oxigênio, e os principais processos que regem esse balanço são a oxidação da matéria orgânica, a nitrificação, a demanda de oxigênio pelo sedimento, a reaeração atmosférica e a fotossíntese (VON SPERLING, 2007).

3.2.2.1 Consumo de Oxigênio

Em termos ecológicos, o impacto mais negativo da poluição orgânica no corpo d'água é a diminuição dos níveis de oxigênio dissolvido. A quantidade de oxigênio requerida para estabilizar, através de processos bioquímicos, a matéria orgânica, é denominada Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO). Este parâmetro é determinado pela medição em laboratório do consumo de oxigênio exercido em uma amostra líquida ao longo de um determinado tempo. Como as águas residuais domésticas são potencialmente ricas em DBO, considerando que o oxigênio dissolvido é um dos principais indicadores da saúde de um ambiente aquático, a DBO é largamente aplicada para mensurar a poluição aquática (BOWIE *et al.*, 1985).

Como relatado na seção 3.1.3, as principais fontes de matéria orgânica e, portanto, de DBO para os estuários, incluem entradas antropogênicas através de fontes pontuais e não pontuais, além de fontes autóctones derivadas da biota aquática. A remoção natural da DBO da coluna d'água pode ocorrer através de sedimentação, degradação microbiana, sorção no sedimento ou consumo bentônico. Segundo Bowie *et al.* (1985), o material carbonáceo que é depositado ou adsorvido se torna parte da demanda de oxigênio bentônica, também denominada demanda de oxigênio pelo sedimento, conforme von Sperling (2007). Segundo von Sperling (2007), a matéria orgânica em suspensão, que forma uma camada de lodo no fundo, também precisa ser estabilizada. Grande parte dessa conversão é realizada sob condições anaeróbicas, devido à dificuldade do oxigênio de penetrar as camadas de sedimentares no fundo, não implicando em consumo de oxigênio. Entretanto, a camada no topo ainda possui acesso ao oxigênio dissolvido, em ordem de alguns milímetros de espessura, em que é exercida uma forma de conversão aeróbica, resultando em consumo de oxigênio. Além disso, alguns produtos parciais da decomposição anaeróbica podem se dissolver exercendo também uma demanda de oxigênio. Outro fator que provoca demanda de oxigênio pelo sedimento é a ressuspensão da matéria orgânica depositada, sendo esse processo relacionado com as condições do escoamento. Dessa forma, von Sperling (2007) destaca que diversos fatores influenciam simultaneamente a demanda de oxigênio pelo sedimento, muitos deles de difícil quantificação.

Segundo Bowie *et al.* (1985), a DBO pode ser dividida em duas frações: carbonácea e nitrogenada. A equação (1) representa a equação geral para o decaimento da DBO carbonácea (BOWIE *et al.*, 1985):



Essa equação representa de forma simplificada o processo de oxidação da matéria orgânica ou mineralização, em que ocorre o consumo do oxigênio dissolvido devido à respiração de microorganismos, principalmente de bactérias heterotróficas. As bactérias, na presença de oxigênio, convertem a matéria orgânica em componentes simples e inertes como o dióxido de carbono e, como resultado, crescem e se reproduzem enquanto houver a disponibilidade de matéria orgânica e oxigênio (VON SPERLING, 2007).

Outro processo de oxidação está associado à conversão da amônia a nitrito e do nitrito a nitrato no processo de nitrificação, explicado detalhadamente na seção 3.2.1. Esse consumo é reconhecido como demanda de segundo estágio (DBO nitrogenada, BOWIE *et al.*, 1985), porque ocorre depois da oxidação da maior parte da matéria orgânica carbonácea. O tempo de atraso acontece devido à menor taxa de crescimento das bactérias nitrificantes quando comparadas às bactérias heterotróficas, o que torna o processo de nitrificação mais lento (VON SPERLING, 2007).

A transformação da amônia a nitrito, pela bactéria *Nitrosomonas*, é representada pela reação apresentada na equação (2) (BOWIE *et al.*, 1985):



A transformação do nitrito a nitrato, pela bactéria *Nitrobacter*, ocorre em sequência, de acordo com a reação apresentada na equação (3) (BOWIE *et al.*, 1985):



Ambas reações provocam consumo de oxigênio e, portanto, devem ser consideradas no balanço de oxigênio dissolvido. Pela relação estequiométrica, na transformação de amônia a nitrito, aproximadamente 3,3 gramas de oxigênio são consumidos para cada grama de nitrogênio-amônia oxidado a nitrogênio-nitrito, e na conversão de nitrito a nitrato, é esperado que 1,14 gramas de oxigênio seja consumido por grama de nitrogênio-nitrito oxidado (BOWIE *et al.*, 1985).

Nas reações apresentadas, a forma nitrogênio orgânico não aparece, visto que o nitrogênio orgânico é hidrolisado a amônia sem consumo oxigênio e apenas a partir de então contribui para a demanda nitrogenada.

3.2.2.2 Produção de Oxigênio

Os processos que contribuem para a adição de oxigênio dissolvido são a reaeração e a fotossíntese.

Segundo von Sperling (2007), a reaeração atmosférica é frequentemente o principal fator responsável pela introdução de oxigênio na água. A transferência de gases é um fenômeno físico através do qual as moléculas são trocadas na interface entre a fase líquida e a fase gasosa. Essa troca resulta um acréscimo na concentração do gás no meio líquido, se esta fase não estiver saturada com esse gás. Isso também ocorre em um corpo d'água, em que a concentração do oxigênio dissolvido é reduzida devido aos processos de estabilização da matéria orgânica e, como consequência, os níveis de oxigênio dissolvido ficam menores do que a concentração de saturação, dada pela solubilidade do gás em função da temperatura e pressão (VON SPERLING, 2007), provocando uma transferência de oxigênio do ar para a água.

A fotossíntese é o principal processo realizado pelos organismos autotróficos para a síntese de matéria orgânica, ocorrendo na presença de luz solar. As algas são os componentes dominantes dos produtores primários, principalmente em lagos e estuários (BOWIE *et al.*, 1985). A equação (4) representa a equação simplificada para a fotossíntese (VON SPERLING, 2007):



Esse processo pode causar variações diurnas nas concentrações de oxigênio dissolvido, devido ao oxigênio produzido a partir da fotossíntese durante o dia na presença de luz combinado ao oxigênio consumido pela respiração algal durante a noite (BOWIE *et al.*, 1985).

3.3 FUNDAMENTOS DA MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA EM ESTUÁRIOS

O conceito de qualidade da água descreve a sua condição considerando aspectos físico-químicos e características biológicas, usualmente em relação a uma finalidade específica. Dentro dessa gama de variáveis, torna-se importante, portanto, um diagnóstico que permita uma aproximação do comportamento de todo o ambiente a partir da avaliação de parâmetros que estimulam sinais típicos de bom ou mau estado do corpo hídrico.

Hobbie (2000) resumiu as principais conclusões de um relatório da *U.S. National Research Council* (NRC), intitulado como *Priorities for Coastal Ecosystem Science*, que listou alguns dos principais efeitos do crescimento da população humana em torno dos ecossistemas estuarinos e, o primeiro deles, aborda a questão dos nutrientes, especialmente nitrogênio, que tem aumentado nos rios, a partir dos quais entram nos estuários podendo gerar florações algais nocivas e severas flutuações nos níveis de oxigênio dissolvido.

Segundo Hobbie (2000), apesar da extensa pesquisa sobre estuários, nossa habilidade para generalizar e prever as consequências das mudanças nesses ambientes é primitiva devido à inerente complexidade e variabilidade associada às modificações espaço-temporais nos fatores físicos e químicos, como dos níveis de salinidade e de oxigênio dissolvido. O autor apresenta cinco tipos de métodos de pesquisa em estuários, os quais foram estabelecidos em 1955 na *National Academy of Science's Beckman Center*, em Irvine, Califórnia, por cientistas da área estuarina, sendo eles: tipo I, que são métodos simples que sintetizam dados descritivos; tipo II, que são métodos mais complexos que correlacionam dados ecológicos com mudanças nas condições ambientais; tipo III e tipo IV, os quais são métodos ainda mais complexos que utilizam modelos mecânicos e tentam realizar previsões de larga-escala; e tipo V, que considera a combinação de vários desses métodos em um esforço sintético. Esse esforço é essencial para responder algumas questões sobre os sistemas estuarinos que dependem do entendimento de complexas interações entre fatores físicos, químicos e biológicos, e a análise dessas interações requer o uso de modelos (HOBBIE, 2000).

Conforme expresso por Lung (1993), na modelagem da qualidade da água podem ser aplicados dois tipos de modelos numéricos: hidrodinâmicos e de qualidade da água propriamente dita. Esses modelos são designados a calcular a concentração ou distribuição de um constituinte, propriedade ou parâmetro no estuário, visto que para determinação de concentrações ou distribuições, processos de transporte e processos de transformação devem ser resolvidos. Os processos de transporte são basicamente hidrodinâmicos e incluem advecção, difusão turbulenta e dispersão, já os processos de transformação envolvem as fontes e sumidouros às quais os parâmetros estão sujeitos e podem ser físicos, químicos ou biológicos.

Lung (1993) apresenta diferenças fundamentais entre a modelagem hidrodinâmica e a modelagem da qualidade da água, que geram um considerável impacto nos avanços destes métodos. A hidrodinâmica deve estar adequadamente descrita pelas três equações

de momentum, pela equação da continuidade e pela equação de estado. Embora parametrizações sejam usualmente requeridas para o fechamento das equações, as equações de momentum e a equação da continuidade são derivadas de princípios fundamentais e têm sido amplamente aceitas nos últimos séculos. Por outro lado, a base dos modelos de qualidade da água é a equação da conservação da massa, para a qual as formulações cinéticas não podem ser representadas de forma similares às equações de momentum nos modelos hidrodinâmicos, sendo a maior parte da cinética formulada utilizando parametrizações e, portanto, um elevado grau de empirismo está envolvido. Assim, dados dos constituintes de qualidade da água do sistema em estudo amostrados e analisados corretamente são essenciais para o sucesso da modelagem, pois as formulações e os valores de seus coeficientes podem ser calibrados e validados.

Segundo James (1993), os estuários, entretanto, são ambientes particularmente difíceis para a obtenção de dados. A validação e a calibração dos modelos numéricos geralmente requer um conjunto de dados adquiridos simultaneamente ao longo de várias seções, profundidades e intervalos de tempo contemplando pelo menos um ciclo de maré, sendo necessários dados como de: elevação e profundidade da água; velocidade; salinidade e temperatura; parâmetros de qualidade da água como OD e DBO; cargas de poluentes que entram nos estuários; escoamento de água doce a partir dos tributários; e estimativas de coeficientes de dispersão, reaeração, entre muitos outros (JAMES, 1993). Por estes motivos, a qualidade dos dados reflete nas análises de sensibilidade para validação de modelos estuarinos. Na Tabela 1 são apresentados resultados de análises de sensibilidade que demonstram essa dificuldade.

Tabela 1: Análises de sensibilidade para coeficientes estuarinos. Fonte: James (1993)

Coeficiente	Efeito da variação de 50% do coeficiente no OD	Faixa de erro provável em medidas de campo
Dispersão	$\pm 50 - 100\%$	$\pm 50 - 100\%$
Reaeração	$\pm 20 - 80\%$	Não é normalmente medido
Demanda de oxigênio pelo sedimento	$\pm 50 - 100\%$	$\pm 20 - 80\%$
DBO	$\pm 20 - 50\%$	$\pm 20\%$
Fotossíntese	$\pm 10 - 80\%$	$\pm 50\%$

3.3.1 Principais Aspectos dos Modelos de Qualidade da Água

Os principais aspectos a serem considerados na modelagem da qualidade da água são as características particulares de cada corpo hídrico (geometria, escoamento e dispersão) e

a escala espacial e temporal dos processos físicos relevantes.

Os processos físicos simulados nos modelos de qualidade da água incluem o escoamento e padrões de circulação, mistura, dispersão, temperatura da água e a distribuição de densidade (BOWIE *et al.*, 1985).

Para os estuários, a ação da maré e dos ventos é geralmente determinante na circulação (FITZPATRICK; IMHOFF, 2001) e, portanto, é necessário que esteja devidamente especificada para a simulação da hidrodinâmica e qualidade da água.

A escala espacial depende das características do corpo d'água. Alguns modelos podem representar um corpo d'água através de um ou dois volumes completamente misturados (CMV), assumir que existe gradiente das concentrações dos constituintes somente em uma direção (1-D), ou ainda apresentar o gradiente na direção vertical, como os aplicados para avaliação da estratificação térmica (PEREIRA, 2004). Caso os processos apresentem gradientes significativos em apenas duas dimensões, para modelar gradientes longitudinais e transversais são utilizados modelos 2-DH, e para gradientes longitudinais e verticais modelos 2-DV, admitindo a homogeneidade lateral, podendo ser aplicados em corpos d'água com estratificação de densidade na coluna d'água ocasionada pela presença de cunha salina, por exemplo (PEREIRA, 2004). Por fim, existem os modelos capazes de representar os gradientes nas três dimensões, os modelos 3D (FITZPATRICK; IMHOFF, 2001).

Existem dois aspectos a serem considerados na determinação das escalas espaciais e temporais do modelo de qualidade da água: a extensão espacial e temporal do problema de qualidade da água; e o intervalo espacial e temporal da computação, ou seja, o passo de tempo e as dimensões espaciais da grade no esquema computacional. Lung (1993) apresenta escalas típicas para variáveis e problemas de qualidade da água. De forma geral, escalas de tempo de curto-prazo (horas a dias) são associadas a escalas espaciais locais e intermediárias (0,5 a 20mi, aproximadamente 0,8 a 35km) e conseguem representar as principais respostas devido a lançamentos de efluentes, possibilitando a análise de variáveis como oxigênio dissolvido, bactérias coliformes e cloro residual. Intervalos de tempo de mês a mês e ano a ano são geralmente utilizadas em escalas regionais (75 a 100mi, aproximadamente 130 a 170km) e representam as principais respostas devido a inputs variáveis sazonalmente como fontes não pontuais da bacia superior à microbacia em análise, sendo possível modelar oxigênio dissolvido, nutrientes e variáveis relacionadas com processos de eutrofização. Já substâncias persistentes, que se decompõem lentamente, requerem longas escalas temporais

(décadas) e espaciais (toda a bacia), pois a maioria destas substâncias tóxicas são acumuladas nos sedimentos e podem permanecer muito tempo. Quanto à discretização espacial, onde as concentrações variam rapidamente, menores espaçamentos devem ser selecionados para melhor reproduzir os gradientes.

No processo de calibração do modelo de qualidade de água é necessário o ajuste das constantes das taxas e coeficientes para compensar diferenças entre condições laboratoriais e de campo, sendo fundamentais dados adquiridos *in situ* para verificação dos resultados do modelo. Em diversos casos, os modelos de qualidade da água são ferramentas de planejamento e não métodos preditivos, ou seja, o modelo é utilizado principalmente para avaliar o espectro de respostas do sistema a determinadas variações e, para isso, extrema acurácia pode não ser requerida, pois a análise de tendências pode ser suficiente para fornecer respostas sobre o problema de qualidade da água em questão (LUNG, 1993). É, portanto, a natureza do problema que determina o grau de calibração requerido, o qual é influenciado por diversos fatores e aumenta de acordo com a complexidade do modelo, sendo esta complexidade atribuída às equações de transporte e cinética e aos termos de entrada.

3.3.2 Modelos de Qualidade da Água

Com o contínuo entendimento dos processos físicos e bioquímicos que permitem estabelecer os modelos teóricos e o avanço das técnicas computacionais, muitos modelos de qualidade de água têm sido desenvolvidos com diferentes algoritmos para diversos tipos de corpos d'água, permitindo a simulação de constituintes da qualidade da água em diferentes escalas espaciais e de tempo.

Wang *et al.* (2013) realizaram um levantamento sobre os modelos de qualidade da água superficial analisando três estágios desde 1925. No primeiro estágio, entre 1925 e 1965, os modelos de qualidade da água tinham como foco as interações entre diferentes constituintes em rios afetados por fontes pontuais de poluição industrial. O transporte, a demanda de oxigênio pelo sedimento, a respiração e fotossíntese das algas foram considerados *inputs* externos, enquanto as fontes não pontuais apenas consideravam a carga de fundo. No início desta fase foi desenvolvido um modelo bilinear simples de OD-DBO, sendo o modelo unidimensional aplicado para resolver problemas de qualidade da água em rios e estuários. Posteriormente, a maioria dos pesquisadores modificaram e continuaram a desenvolver modelos S-P. Thomas Jr. (1948), por

exemplo, realizou estudo para analisar a redução da DBO sem o consumo de oxigênio, mas sim devido à deposição de sedimentos e floculação, sendo então introduzido o coeficiente de floculação no estado estacionário do modelo S-P para distinguir duas vias de remoção de DBO. Já O'Connor (1960; 1967) dividiu o parâmetro DBO em carbonácea e nitrogenada e adicionou efeitos de dispersão, desenvolvendo o modelo para o cálculo de balanços de oxigênio dissolvido em estado estacionário para estuários e em regime transiente para rios. Os modelos construídos por O'Connor para estas aplicações utilizavam soluções analíticas para as equações diferenciais parciais da conservação da massa e de movimento; entretanto, estas soluções requeriam algumas considerações como geometria constante para o ambiente (PEREIRA, 2004). Camp (1963) e Dobbins (1964), *apud* Wang *et al.* (2013), adicionaram dois coeficientes, incluindo a taxa de variação da DBO causada por ressuspensão de sedimentos e escoamento superficial, bem como a taxa de variação do OD controlada pela fotossíntese das algas e respiração, à equação de Thomas. Thomann (1963) começou a desenvolver modelos de diferenças finitas para a avaliação de problemas de qualidade da água, permitindo que fosse melhorada a representação das características físicas dos sistemas em estudo (PEREIRA, 2004).

No segundo estágio, entre 1965 e 1995, segundo Wang *et al.* (2013), os modelos de qualidade da água tiveram um rápido progresso baseado nos estudos de estimativa dos coeficientes multidimensionais dos modelos de DBO-OD. O modelo unidimensional foi atualizado para bidimensional e sistemas de modelos não-lineares foram desenvolvidos incluindo os ciclos de nitrogênio e fósforo, fitoplâncton, zooplâncton e focando nas relações entre taxa de crescimento biológico e nutrientes; luz solar e temperatura; e fitoplâncton e a taxa de crescimento de zooplâncton. O método numérico de diferenças finitas e de elementos finitos foram aplicados devido às relações não-lineares então adicionadas, utilizando modelos uni ou bidimensionais. Ainda neste estágio o número de variáveis de estado aumentou significativamente e os modelos tridimensionais foram desenvolvidos, introduzindo também módulos de hidrodinâmica e a influência dos sedimentos nos modelos de qualidade da água. Os modelos puderam considerar aportes de fontes difusas como uma variável e os fluxos de sedimento puderam variar de acordo com diferentes condições de entrada. Modelos como OTIS da USGS, QUAL (GRENNEY *et al.*, 1978; BROWN; BARNWELL Jr., 1987), MIKE (DHI, 1993) e WASP (AMBROSE *et al.*, 1988; AMBROSE *et al.*, 1993) foram desenvolvidos nessa fase. O modelo matemático unidimensional OTIS (One-Dimensional Transport with

Inflow and Storage) é atualmente utilizado para caracterizar o destino e o transporte de solutos em córregos e rios, sendo a equação de advecção-difusão governante com termos adicionais que consideram o armazenamento temporário, entrada lateral, decaimento de primeira ordem e sorção (USGS, 2014). Os modelos QUAL (QUAL I, QUAL II, QUAL2E, QUAL2E UNCAS e QUAL2K) são adequados para aplicação em rios e fontes não pontuais, incluindo modelos unidimensionais de estado estacionário ou modelos dinâmicos, sendo desenvolvido pela agência de proteção ambiental americana (*US Environmental Protection Agency* – USEPA) a partir de 1970. Os modelos MIKE (MIKE11, MIKE21 e MIKE31) foram desenvolvidos pelo instituto de hidráulica dinamarquês (*Danish Hydrology Institute* – DHI) e representam um conjunto de modelos com diversos módulos capazes de simular a hidrodinâmica, advecção-dispersão, qualidade da água, eutrofização, transporte de sedimentos, entre outros, incluindo modelos uni, bi e tridimensionais. Processos físicos, químicos e biológicos de qualidade da água são definidos através do ECO Lab, um framework que possui modelos padrão como base (DHI, 2016). Esses padrões descrevem os resultados de concentrações de variáveis como bactérias, depleção de oxigênio devido a DBO, excesso de concentração de nutrientes, interações clorofila-nutrientes e degradação de substâncias químicas. O modelo WASP (*Water Quality Analysis Simulation Program*) também foi desenvolvido pela EPA destinado à simulação da qualidade da água em rios, estuários, regiões alagadas costeiras e reservatórios, incluindo modos uni, bi e tridimensionais. Esse modelo inclui tanto a coluna d'água quanto bentos adjacentes, processos de advecção, dispersão, fontes pontuais e fontes difusas. O modelo suporta diversos constituintes de qualidade da água e pode ser associado a modelos hidrodinâmicos e de transporte de sedimentos para fornecer temperatura, salinidade e fluxos de sedimentos, possuindo atualmente acoplado um modelo de diagênese do sedimento vinculado a um modelo de eutrofização, que calcula a demanda de oxigênio pelo sedimento e os fluxos de nutrientes a partir dos sedimentos (EPA, 2014).

No terceiro estágio, após 1995, Wang *et al.* (2013) ressaltam que as fontes difusas foram reduzidas nos ambientes devido ao maior controle ambiental, entretanto, a deposição atmosférica como de compostos orgânicos, metais pesados e compostos nitrogenados cresceu e aumentaram seu efeito sobre a qualidade da água. Apesar de nutrientes e substâncias tóxicas terem sido incluídos nos modelos, estes materiais não são depositados apenas diretamente na água, pois podem ser depositados no terreno de uma bacia hidrográfica e serem transferidos para o corpo d'água, o que representa uma

importante fonte. Portanto, nesta fase, modelos de poluição do ar foram integrados aos modelos de qualidade da água para avaliar diretamente a contribuição de substâncias por deposição atmosférica.

Além dos modelos típicos como QUAL, WASP, MIKE, outros modelos de qualidade da água têm sido desenvolvidos. Como exemplo, a EPA desenvolveu um sistema que permite avaliar rapidamente grandes quantidades de fontes pontuais e não pontuais denominado BASINS (EPA, 2014). Além deste, também desenvolveu o modelo EFDC como uma ferramenta para a gestão da qualidade da água. Os modelos mencionados anteriormente incluindo o modelo de Streeter-Phelps, QUAL, WASP, BASINS, MIKE e EFDC foram amplamente aplicados em todo o mundo. Geralmente, os EUA ou países europeus desenvolveram modelos de qualidade da água mais avançados. Alguns desses modelos foram estabelecidos em universidades ou institutos dos últimos anos. Na China, por exemplo, o modelo Delft3D, desenvolvido por WL | Delft Hydraulics (Delft, Holanda) vem sendo utilizado para simular a qualidade da água desde 1970 e atualmente é o modelo padrão da Agência Ambiental de Hong Kong.

Fitzpatrick e Imhoff (2001) realizaram uma síntese dos modelos de qualidade da água, de acordo com o tipo de representação espacial, conceptualização, representação temporal, tipo de corpo d'água e processos (variáveis de estado), apresentada na Tabela 2. É possível verificar que o modelo Delft3D no ano de 2001 já estava entre os mais utilizados para a modelagem da qualidade da água, sendo também um dos mais completos em termos de representação espacial (1D, 2D e 3D), conceptualização (determinístico), representação temporal (estacionário e não estacionário), aplicabilidade (lagos, reservatórios, rios, estuários e costa), constituintes e processos (patogênicos, DBO, eutrofização, sedimentos e transformações químicas). Além disso, a facilidade de acoplamento com a hidrodinâmica simulada pelo próprio modelo (Delft3D-FLOW) é uma vantagem da aplicação deste nos estudos de qualidade da água. Na relação apresentada por Fitzpatrick e Imhoff (2001), apenas os modelos MIKE (MIKE 21 e MIKE31) e GEMSS-WQM são equivalentes ao modelo Delft3D quanto às características apresentadas na Tabela 2; entretanto, o último, bastante utilizado e aprimorado pelo *Surfacewater Modeling Group* da *Environmental Resources Management* (SMG/ERM), possui uma política de distribuição mais restritiva (GEMSS, 2014). Com relação ao modelo MIKE, Baptistelli (2008) fez uma análise crítica da utilização da modelagem matemática na dispersão de efluentes no Sistema Estuarino de Santos – São Vicente (SP, Brasil), para o período de verão de 2002, em que foi

comparado o desempenho dos modelos hidrodinâmicos MIKE21, POM e Delft3D, sendo encontrados os seguintes coeficientes de correlação entre os resultados das simulações e dados de medição de campo para a componente leste-oeste (direção principal do escoamento) do vetor velocidade: 0,63 para o MIKE 21 (considerando 20 dias de processamento); 0,70 para o POM (30 dias); 0,80 para o Delft3D (20 dias); portanto, o melhor desempenho foi encontrado para o modelo Delft3D em um período mais curto de processamento.

Tabela 2: Alguns dos modelos de qualidade da água mais utilizados e suas principais características. Fonte: Modificado de Fitzpatrick e Imhoff (2001) *apud* Pereira (2004).

Modelo	Representação Espacial			Conceptualização		Representação Temporal		Tipo de Corpo d' Água					Processos				
	1D	2D	3D	Empírico	Determinístico	Estacionário	Não Estacionário	Lago	Reservatório	Rio	Estuário	Costa	Patogênicos	DBO	Eutrofização	Sedimentos	Transformações químicas
AESOP	x	x			x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	
AQUASEA		x			x	x	x	x	x		x	x	x	x			
BATHTUB	x			x		x		x	x						x		
BFWASP	x	x	x		x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	
C3			x		x	x	x	x	x		x	x	x	x			
CE-QUAL-ICM	x	x	x		x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	
CE-QUAL-R1	x				x	x	x	x	x				x	x			
CE-QUAL-RIV1	x				x	x	x			x			x	x			
CE-QUAL-W2		x			x	x	x	x	x				x	x		x	
EFDC	x	x	x		x	x	x	x	x		x	x			x	x	
EUTROMOD	x			x		x		x	x						x		
GEMSS-WQM	x	x	x		x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	x
GLLVHT			x		x	x	x	x	x		x	x			x		
HEM1D	x				x	x	x	x	x		x	x		x	x	x	
HEM2D		x			x	x	x	x	x		x	x		x	x	x	
HEM3D			x		x	x	x	x	x		x	x		x	x	x	
HSPF-RCHRES	x				x	x	x	x	x		x		x	x			x
ISIS-QUALITY	x				x	x	x			x	x		x	x			
MIKE11-WQ	x				x	x	x		x		x		x	x		x	x
MIKE21-WQ		x			x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	x
MIKE31-WQ			x		x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	x
PHOSMOD	x			x	x	x	x	x							x	x	
QUAL2E	x				x	x	x			x			x	x		x	x
SOBEK	x				x	x	x		x				x	x			x
TPWQM	x				x	x	x				x		x	x		x	
WASP	x	x	x		x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	
DEL3D-WAQ	x	x	x		x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	x

3.4 MODELO DELFT3D-FLOW E MÓDULO D-WATER QUALITY

O modelo Delft3D é constituído de vários módulos incluindo o módulo hidromorfodinâmico e de transporte de constituintes conservativos FLOW e de ecologia e qualidade da água DELWAQ (D-Ecology e D-Water Quality, respectivamente), sendo o código deste último aberto à comunidade científica em agosto de 2013. D-Water Quality é um módulo multi-dimensional que resolve a equação de advecção-difusão-reação para uma malha computacional pré-definida e para uma ampla quantidade de substâncias e processos. As informações hidrodinâmicas devem ser impostas, sendo derivadas de um modelo hidrodinâmico previamente validado, podendo ser utilizado o modelo Delft3D-FLOW. Trabalhos atestam a acurácia desse modelo na simulação da qualidade da água, entre eles: Pereira (2003), Chen e Mynett (2006), Baptistelli (2008), Falkenberg (2009), Hekstra (2013) e Pokavanich *et al.* (2013).

Pereira (2003) avaliou os processos que regem a qualidade da água da Lagoa dos Patos utilizando o modelo Delft3D. Neste trabalho destacam-se as seguintes considerações: médias mensais de descargas fluviais e valores diários de magnitude e direção do vento interpolados para o período de interesse; utilização de uma componente harmônica de maré uniforme no contorno; malha vertical de duas camadas, cada uma contemplando 50% da profundidade; e aporte de substâncias nos principais tributários da lagoa a partir de dados medidos mensalmente em cerca de um ano, interpolados linearmente para o período de simulação. O modelo hidrodinâmico foi validado para a salinidade, que exerce grande influência nos processos de qualidade da água. O autor relata que os resultados obtidos pelo módulo FLOW foram semelhantes aos obtidos em outros estudos que utilizaram o modelo de circulação da Universidade de Princeton (POM) para a Lagoa dos Patos. Para a qualidade da água foram avaliados os seguintes constituintes: material em suspensão, oxigênio dissolvido, DBO, nitrato, amônio, nitrogênio total, fosfato, carbono orgânico total, sílica e alguns metais pesados. Entre os processos considerados estão a ressuspensão, sedimentação, desnitrificação, nitrificação, reaeração, oxidação da matéria orgânica por via bacteriana, adsorção do íon fosfato pelo material em suspensão e precipitação. Para a verificação do módulo D-Water Quality, foram utilizados dados de parâmetros físicos, químicos e biológicos de sessenta estações na lagoa. Os resultados das simulações mostraram que o modelo representou a tendência do comportamento dos constituintes avaliados e que desvios

podem ser associados à utilização de dados médios, únicos disponíveis, e pela desconsideração de alguns processos relevantes devido à ausência de dados medidos requeridos como entradas. As diferenças entre os valores dos parâmetros modelados e medidos, entretanto, puderam dar indicativos dos processos que regem a qualidade da água da Lagoa dos Patos, considerados ou não nas simulações, analisando, entre outros fatores, a subestimação ou superestimação dos constituintes e suas distribuições espaciais.

Chen e Mynett (2006) desenvolveram um modelo numérico para previsão de florações fitoplanctônicas na costa da Holanda e, para isso, utilizaram o modelo Delft3D para calcular as condições abióticas (hidrodinâmica e qualidade da água). Foi utilizada uma grade curvilínea, sendo modelados os nutrientes nitrato e fosfato. Para o nitrato, os processos de mineralização, nitrificação e desnitrificação foram incluídos. Para o fosfato foi considerado, além destes, o processo de adsorção-desorção, exceto a mineralização, que é fortemente afetada pelas condições de oxidação-redução. Com essas configurações para o Delft3D, em análise qualitativa os autores alcançaram boa aproximação entre resultados do modelo de floração proposto (clorofila a) e dados observados.

Falkenberg (2009) aplicou o modelo Delft3D-FLOW e módulo D-Water Quality para o estudo da mistura, dispersão e qualidade da água da Baía de Paranaguá. O modelo hidrodinâmico foi utilizado de forma bidimensional integrado na vertical e forçado por constituintes astronômicas e descargas fluviais médias. Na validação, os valores mínimos e máximos de erro médio quadrático (RMSE) obtidos através da comparação de dados de correntes simulados e medidos para um dos transectos avaliados foram respectivamente de 0,04 e 0,32 m/s para a magnitude e 4,5 e 115,7° para a direção, contemplando um período de sizígia. A mediana de todos os erros médios da magnitude e direção deste transecto foi de 0,09 m/s e 29,3°, respectivamente. A partir do modelo hidrodinâmico validado, com o módulo D-Water Quality foi modelado o material particulado inorgânico em suspensão (silte e areia) e transporte de fundo de sedimentos não coesivos sob os processos de sedimentação e ressuspensão, com boa correlação entre valores medidos e simulados verificada qualitativamente.

Hekstra (2013) realizou modelagem de contaminantes utilizando o modelo Delft3D (FLOW e D-Water Quality) para análise do tempo de residência em um sistema manguezal em Singapura. Foi realizada a modelagem com uma substância conservativa para diversos cenários variando características da maré, localização das descargas e

modelo de vegetação. O modelo hidrodinâmico foi configurado no modo 2DH. A correlação e o RMSE para a elevação foram, respectivamente, 0,97 e 0,21m, sendo o RMSE da ordem de 5%. Para a velocidade, foi feita uma análise qualitativa, em que o autor demonstra que os resultados estão de acordo com as observações *in situ*, estando o modelo apto para a simulação da qualidade da água. A partir disso, foram feitas diversas análises para o tempo de residência do constituinte de acordo com as condições hidrodinâmicas.

Pokavanich *et al.* (2013) realizaram uma investigação da hidrodinâmica e qualidade da água na Baía do Kwait para o verão de 2012 utilizando dados de campo e simulação numérica, através do modelo Delft3D. Foi aplicado o modelo tridimensional para hidrodinâmica (Delft3D-FLOW) e qualidade da água (D-Water Quality) através de uma malha horizontal curvilínea com sete camadas verticais do tipo sigma. A modelagem da qualidade da água contemplou quatorze variáveis, entre elas oxigênio dissolvido, fitoplâncton, detritos na coluna d'água e macronutrientes, sob diversos processos, considerando quatro emissários de esgoto ao longo da costa da cidade com descargas constantes. A verificação do modelo hidrodinâmico foi apresentada em termos de elevação da água, velocidade do escoamento, temperatura e salinidade, sendo verificado, entre outras observações, que: a elevação e a velocidade do escoamento foram muito bem reproduzidas; em termos de salinidade, foram reproduzidas as diferenças entre superfície e fundo e suas variações temporais; e o gradiente horizontal mostrando salinidade do mar em direção à parte interna da baía também foi bem simulado. Para o modelo de qualidade da água, a verificação foi realizada para as concentrações dos nutrientes, sendo mostrado que essas concentrações se mantiveram nos intervalos de ocorrência dos valores observados.

3.5 ESTUDOS PRETÉRITOS DE MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA NA BAÍA DE VITÓRIA

Saldanha (2007) realizou a análise da influência do rio Santa Maria da Vitória na Baía de Vitória através de modelagem computacional e, entre outras aplicações, foi avaliado o comportamento de um constituinte conservativo e um não conservativo sob diversos cenários de vazão do rio e marés. Para isso foi utilizado o modelo SisBAHIA da Fundação COPPETEC de forma 2D-H. O modelo hidrodinâmico utiliza o método de elementos finitos na discretização espacial e o transporte de solutos é feito pelo método

de trajetória de partículas (SALDANHA, 2007). No modelo de transporte foram consideradas apenas reações cinéticas sem sinergia, isto é, o transporte de cada constituinte foi feito sem interação com os outros. Com relação aos rios afluentes da Baía de Vitória, foi considerado apenas o rio Santa Maria da Vitória com vazão constante para simulação da hidrodinâmica e do transporte dos constituintes, sendo avaliados períodos secos e chuvosos. A vazão fluvial de cheia utilizada foi de $21,0 \text{ m}^3/\text{s}$ e a vazão fluvial de estiagem igual a $6,0 \text{ m}^3/\text{s}$, que representam a média total da série histórica de vazão do Rio Santa Maria da Vitória para os anos de 1961 a 1979 considerando os valores de desvio padrão. Dentre as conclusões obtidas para o lançamento do constituinte conservativo, foi verificado que: o espalhamento no interior da baía se estabiliza em torno de 15 a 20 dias; durante a maré enchente o soluto esteve em menores concentrações na baía; e os resultados mais desfavoráveis à qualidade da água foram associados a períodos de maré de quadratura e vazão fluvial de estiagem.

Cassini (2011) aplicou o modelo ecológico EPA-Aquatox na Baía de Vitória para análise de aspectos de qualidade da água e as consequências da poluição orgânica no ambiente estuarino através da simulação de cenários para os anos 2009 e 2010, em que verificou que o aporte orgânico urbano possui uma contribuição muito mais significativa do que o relacionado com o aporte orgânico fluvial, entretanto, considerou apenas o aporte fluvial do rio Santa Maria da Vitória. Foram utilizados dados de quatro campanhas obtidos no monitoramento realizado pelo Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA), obtidos no ano 2009 para os seguintes constituintes: DBO, fósforo total, nitrogênio amoniacal e nitrato. Na etapa de calibração, o autor variou o aporte estimado de carga urbana de matéria orgânica e nutrientes estimados a partir de dados populacionais, e os valores da carga de DBO5 e nutrientes que podem chegar à Baía de Vitória através das galerias pluviais e rios.

Barros (2012) apresentou um modelo de qualidade da água aplicado a áreas alagáveis que sofrem com o processo de alagamento e secamento, acoplado ao modelo hidrodinâmico 2D-H SisBaHiA, considerando uma técnica de alagamento e secamento que contempla a rugosidade e a porosidade do meio. Os processos de reação cinética do modelo de qualidade da água foram modificados para incorporar efeitos de alagamento e secamento, sendo o método avaliado na modelagem corpos hídricos hipotéticos e no estuário da Baía de Vitória. Com relação à modelagem da qualidade da água do estuário da Baía de Vitória, o objetivo do trabalho foi verificar qualitativamente o comportamento do oxigênio dissolvido e da amônia. Foram considerados apenas os

tributários Santa Maria da Vitória e Bubu a uma vazão média de 25,99 e 0,37 m³/s, respectivamente, em 30 dias de simulação. Para o cálculo da temperatura da água foram adotados valores constantes para a radiação solar, temperatura do ar máxima, temperatura do ar mínima e umidade relativa do ar. Foi verificado o comportamento das variáveis oxigênio dissolvido e amônia. Foram discutidos os resultados de concentração de oxigênio dissolvido, sendo observadas as maiores concentrações na preamar em relação à baixamar, com os maiores valores encontrados nos trechos entre o Canal da Passagem, Baía do Espírito Santo e canal de acesso ao Porto de Vitória, com concentrações diminuindo no sentido das regiões de mangue. A autora relata que estas diferenças podem ser atribuídas aos processos de nitrificação, decomposição da matéria orgânica e demanda de oxigênio pelo sedimento que promovem a remoção de oxigênio dissolvido da coluna d'água. Com o método foi possível observar que a baixa concentração de oxigênio dissolvido durante a baixamar nas áreas de manguezal é drenada para os canais e, posteriormente, lançada na Baía de Vitória. Já a concentração de oxigênio dissolvido transportada para os canais de maré durante o alagamento é rapidamente consumida pela planície de mangue, podendo este comportamento evidenciar que os processos de nitrificação e decomposição da matéria orgânica são superiores nas regiões de manguezal em relação ao interior da Baía de Vitória.

4 METODOLOGIA

4.1 ÁREA DE ESTUDO

A área de estudo para simulação da hidrodinâmica abrange o Sistema Estuarino da Ilha de Vitória, onde está situada a Baía de Vitória, em que foi realizada a modelagem da qualidade da água. O sistema está localizado na costa central do Brasil, no entorno da cidade de Vitória, Espírito Santo, sob as coordenadas $20^{\circ}15' S$ e $40^{\circ}20' O$ (Figura 3).

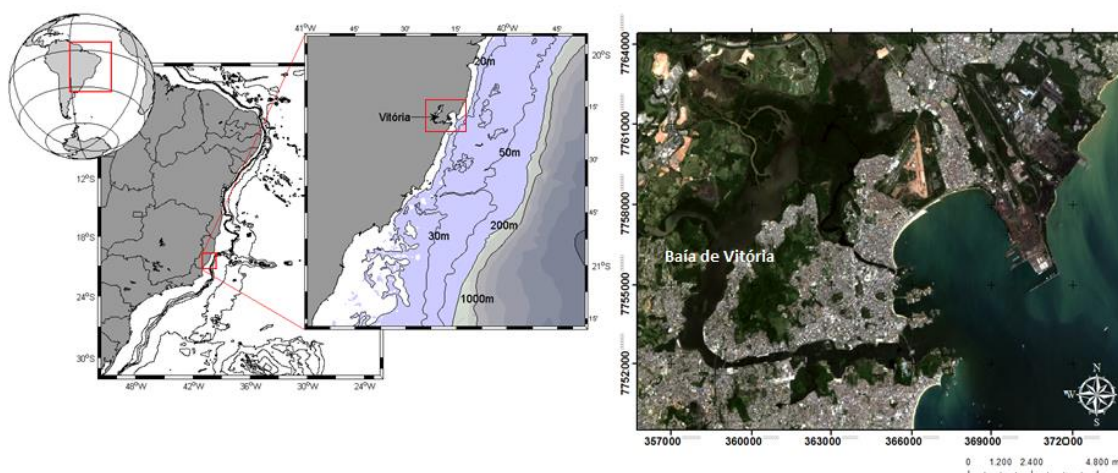


Figura 3: Localização da área de estudo.

Os principais contribuintes de água doce para a Baía de Vitória são os rios Santa Maria da Vitória, Bubu, Itanguá, Aribiri e Marinho.

O rio Santa Maria da Vitória situa-se na região central do Espírito Santo, abrangendo os municípios Santa Maria de Jetibá, Santa Leopoldina, Cariacica, Serra e Vitória, sendo suas águas utilizadas para abastecimento, geração de energia, pesca, turismo e irrigação, com sua bacia sob influência de atividades econômicas voltadas também para a agricultura, recebendo efluentes domésticos ao longo de seu curso. O rio Bubu possui sua bacia integralmente localizada no município de Cariacica, sendo as atividades realizadas na sua cabeceira predominantemente agropecuárias, enquanto o trecho inferior é ocupado por áreas urbanas. O rio Itanguá também se encontra no território de Cariacica e o crescimento da cidade, com o constante processo de urbanização, descaracterizaram seu curso devido a diversos aterros e canalização de parte de seu trecho. O rio Aribiri se encontra no território do município de Vila Velha e pode ser classificado como uma canal de drenagem, com características estuarinas nas regiões

mais próximas de sua foz na Baía de Vitória, conforme o Plano Municipal de Saneamento Básico de Vila Velha - ES (2014). Segundo o Plano Municipal de Saneamento Básico de Cariacica – ES (2013), o rio Marinho representa o limite territorial entre os municípios de Cariacica e Vila Velha, sendo 80% de sua bacia hidrográfica ocupada por imóveis residenciais ou industriais.

Com relação à descarga de água, o rio Santa Maria da Vitória é o principal tributário, com uma vazão média anual de 13,7 m³/s, calculada por Nascimento (2013) com base nos dados da Agência Nacional de Águas disponibilizados no portal HidroWeb, enquanto a vazão estimada dos demais somadas não ultrapassam 3 m³/s, segundo Rigo (2004). Apesar disso, os pequenos contribuintes fornecem significativos aportes de constituintes que podem influenciar a qualidade da água da baía, conforme dados do Monitoramento da Bacia Hidrográfica do rio Santa Maria realizado pela Agência Estadual de Recursos Hídricos (AGERH) (seção 4.3.3).

O período de águas altas dos rios vai de dezembro a março, com vazões máximas ocorrendo com mais frequência em dezembro, e a estiagem vai de julho a setembro, com as vazões mínimas ocorrendo frequentemente em setembro, sendo que, de forma geral, as descargas acompanham os índices de precipitação (ANA, 2015).

A hidrodinâmica local é regida principalmente pela maré astronômica, seguida da maré meteorológica e dos ventos (VIÉGAS, 2006). A elevada contribuição da maré astronômica e do Rio Santa Maria da Vitória para a hidrodinâmica da região da Baía de Vitória pode ser observada no trabalho de Nascimento (2013). O regime de maré na região é classificado como de micromarés (amplitude inferior a 2m), semidiurnas com desigualdades diurnas entre duas baixamares e preamares observadas por Barros Filho (2002), sendo M2 a principal componente lunar de maré com período de 12,42h (NASCIMENTO, 2013). Na região de estudo, o manguezal possui papel importante na deformação da onda de maré ocasionando um acréscimo nas velocidades na baía (CHACALTANA *et al.*, 2003; RIGO, 2004). Chacaltana *et al.* (2003) observaram um impacto de até 45% nos valores de velocidade ao desconsiderar o alagamento do manguezal nas simulações realizadas para a região.

A baía está localizada em uma região metropolitana, em que sofre grande influência da antropização associada às instalações industriais, à presença de um dos complexos portuários mais importantes do país, o Porto de Vitória, e à pressão referente à grande densidade demográfica nas adjacências, que geram inúmeros impactos sobre a qualidade ambiental da região. Somado a isso, o aporte de efluentes domésticos tratados

e *in natura* drenados de toda área urbana de Vitória e de parte de Vila Velha, Cariacica e Serra contribuem para a degradação do meio ambiente. Todos esses fatores levam Diegues (1999) a considerar esse sistema um dos mais criticamente degradados da costa brasileira.

Deve ser destacado ainda que a região abriga importantes unidades de conservação no entorno, entre elas, a Estação Ecológica Ilha do Lameirão, área de proteção integral destinada à preservação da natureza e à realização de pesquisas científicas, segundo o Sistema Nacional de Unidades de Conservação (SNUC), através da Lei Federal 9.985. Essa unidade abrange parte de um ecossistema manguezal ao norte da Baía de Vitória que ocupa uma área de aproximadamente 20 km².

4.2 MODELAGEM HIDRODINÂMICA

4.2.1 Modelo Delft3D-FLOW

Para reconstituir a hidrodinâmica foi utilizado o módulo FLOW do modelo numérico de código aberto Delft3D. Este módulo é um sistema integrado de modelagem hidrodinâmica e do transporte de constituintes conservativos como salinidade e temperatura. Ele fornece a base hidrodinâmica para os outros módulos como o de qualidade da água de campo afastado, módulo D-Water Quality, podendo ser utilizado de forma bidimensional (2DH, integrado na profundidade) ou tridimensional (3D) para escoamentos não estacionários e fenômenos resultantes de forçantes como de maré e meteorológicas, incluindo os efeitos das diferenças de densidade devido à distribuição não uniforme de temperatura e salinidade (GERRITSEN *et al.*, 2007). Ele pode ser utilizado para modelar o escoamento em mares de plataforma, áreas costeiras, estuários, lagoas, rios, lagos e regiões oceânicas.

O modelo hidrodinâmico é forçado pela maré nos contornos abertos, pelo cisalhamento do vento na superfície livre, pelos gradientes de pressão devido aos gradientes da superfície livre (barotrópico) ou gradientes de densidade (baroclínico). Os termos fonte e sumidouro são incluídos nas equações para simular descargas e retiradas de água. Na direção horizontal pode ser utilizada uma malha curvilínea ortogonal, seja ela retangular simples, esférica ou curvilínea, sendo suportados dois sistemas de coordenadas: coordenadas cartesianas (ξ, η) e coordenadas esféricas (λ, ϕ) (DELTARES, 2014a). Na direção vertical são oferecidos dois diferentes sistemas de malha: o sistema de

coordenadas σ (modelo σ) e o sistema de coordenadas cartesianas Z (modelo Z) (DELTARES, 2014a).

4.2.1.1 Modelo Matemático do Movimento da Água e do Transporte de Substância e Temperatura

No modelo matemático do movimento d'água são resolvidas as equações de águas rasas derivadas das equações de Navier-Stokes tridimensionais para um fluido incompressível, com a consideração de hidrostática e aproximação de Boussinesq, como resolve o modelo Delft3D-FLOW. As equações tridimensionais que descrevem o escoamento turbulento médio podem ser obtidas a partir das equações instantâneas de Navier-Stokes após realizar uma média ao longo das escalas de tempo (*Reynolds-averaged Navier-Stokes equations*). Tais equações expressam o princípio físico da conservação da massa e do *momentum* (GERRITSEN *et al.*, 2007). Nesta seção serão descritas as equações de águas rasas, para a qual a profundidade é considerada como sendo bem menor que as escalas de comprimento horizontal do fenômeno a ser estudado. Sob a consideração de que as acelerações verticais devido aos efeitos de empuxo e devido às variações abruptas da batimetria são pequenas quando comparadas com a aceleração gravitacional, a componente vertical da equação do *momentum* é reduzida à relação da pressão hidrostática, conforme a equação (5) (DELTARES, 2014a):

$$\frac{\partial P}{\partial \sigma} = -g\rho H \quad (5)$$

Na equação (6) é dada a pressão hidrostática após integração:

$$P = P_{atm} + gH \int_{\sigma}^0 \rho(x, y, \sigma', t) d\sigma' \quad (6)$$

As componentes horizontais do gradiente de pressão (P_u e P_v), considerando as variações de densidade no meio, são equacionadas conforme a regra de Leibnitz, como mostrado por Gerritsen *et al.* (2007); onde cada componente é representada por dois termos: (i) representa o efeito barotrópico (função de ξ e g); e (ii) representa o efeito baroclínico (função de σ e ρ). Nesta formulação, as variações de densidade são negligenciadas, exceto no termo de empuxo, o que é conhecido como aproximação de Boussinesq. Portanto, variações na quantidade de movimento devido à variação de massa não são consideradas, o que é responsável por apenas 3-4% da variação de quantidade de movimento em corpos d'água naturais (GERRITSEN *et al.*, 2007). As

equações de águas rasas tridimensionais hidrostáticas, mostradas em coordenadas cartesianas retangulares na horizontal e em coordenadas σ na vertical, são apresentadas nas equações (7), (8) e (9) (GERRITSEN *et al.*, 2007):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\omega}{d+\zeta} \frac{\partial u}{\partial \sigma} - f v = -\frac{1}{\rho} P_u + F_u + \frac{1}{(d+\zeta)^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\nu_v \frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) \quad (7)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\omega}{d+\zeta} \frac{\partial v}{\partial \sigma} + f u = -\frac{1}{\rho} P_v + F_v + \frac{1}{(d+\zeta)^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\nu_v \frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) \quad (8)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial \sigma} = -\frac{\partial \zeta}{\partial t} - \frac{\partial[(d+\zeta)u]}{\partial x} - \frac{\partial[(d+\zeta)v]}{\partial y} + H(q_{in} - q_{out}) + Pr - E \quad (9)$$

onde d é a profundidade da água abaixo de uma plano de referência (m); f é o parâmetro de Coriolis (1/s); $F_{u,v}$ são as componentes x e y das forças externas (N/m²); u, v, w são as componentes x, y, z da velocidade (m/s); ρ é a massa específica da água (kg/m³); ν_v é a viscosidade turbulenta (m²/s); ζ é a elevação da superfície livre acima do nível de referência (m); H é a profundidade total (m); q_{in} representa fonte local por unidade de volume (1/s); q_{out} representa sumidouro local por unidade de volume (1/s); Pr é a precipitação (m/s); E é a evaporação (m/s); P_u é a componente x do gradiente de pressão (m/s); e P_v é a componente y do gradiente de pressão (m/s).

As velocidades verticais ω , no sistema de coordenadas σ , são computadas a partir da equação da continuidade, apresentada na equação (10)

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial[(d+\zeta)u]}{\partial x} + \frac{\partial[(d+\zeta)v]}{\partial y} + \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} = Q \quad (10)$$

pela integração na vertical do fundo até um nível σ ($-1 \leq \sigma \leq 0$) (GERRITSEN *et al.*, 2007). A variável ω é a velocidade vertical relativa ao plano σ em movimento, podendo ser interpretada como a velocidade associada aos movimentos de subida e descida.

A velocidade vertical w no sistema de coordenadas cartesianas $x - y - z$ pode ser expressa em termos de velocidades horizontais, profundidade, nível da água e velocidade vertical σ de acordo com a equação (11) (GERRITSEN *et al.*, 2007):

$$w = \omega + u \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) + v \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right) + \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial \zeta}{\partial t} \right) \quad (11)$$

Na equação 10, Q representa as contribuições por unidade de área devido à descarga ou à captação de água, precipitação e evaporação apresentadas na equação (12) (GERRITSEN *et al.*, 2007):

$$Q = H \int_{-1}^0 (q_{in} - q_{out}) d\sigma + P - E. \quad (12)$$

O transporte de substância e temperatura é modelado pela equação de advecção-difusão, apresentada na equação (13) na forma conservativa em coordenadas cartesianas na

horizontal e coordenadas σ na vertical (DELTARES, 2014a). São incluídos termos de fonte e sumidouro e processos de decaimento de primeira ordem, já os processos mais complexos (bioquímicos) envolvidos na modelagem da qualidade da água são resolvidos pela equação de advecção-difusão-reação (DELTARES, 2014a), apresentada na seção 4.3.1.1.

$$\frac{\partial[(d+\zeta)c]}{\partial t} + \frac{\partial[(d+\zeta)uc]}{\partial x} + \frac{\partial[(d+\zeta)vc]}{\partial y} + \frac{\partial(\omega c)}{\partial \sigma} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_H (d + \zeta) \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_H (d + \zeta) \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right] + \frac{1}{d+\zeta} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[D_V \frac{\partial c}{\partial \sigma} \right] - \lambda_d (d + \zeta) c + S \quad (13)$$

Na equação (13), λ_d representa os processos de decaimento de primeira ordem; S representa os termos de fonte e sumidouro; c é a concentração da massa; e D_H e D_V representam respectivamente a difusividade horizontal e a difusividade vertical. Para solucionar essas equações a viscosidade vertical (ν_V), viscosidade horizontal (ν_H), D_H e D_V precisam ser prescritas, sendo isto explicado no item 4.2.1.2.

São resolvidas também outras duas equações de estado para a massa específica (UNESCO, 1981) e para a energia interna (em função da temperatura e calor específico a volume constante) (DELTARES, 2014a).

4.2.1.2 Modelo de Turbulência

O modelo de turbulência é utilizado na determinação de ν e D (coeficiente de viscosidade turbulenta e coeficiente de difusividade turbulenta, respectivamente). Contudo para escoamentos de águas rasas tridimensionais os coeficientes de viscosidade turbulenta e de difusividade turbulenta horizontais (ν_H , D_H) são muito maiores que as suas contrapartes verticais (ν_V , D_V). Os coeficientes horizontais são considerados como uma superposição de três partes: uma parte devido à viscosidade molecular, uma devido à “turbulência 2D” e uma parte devido à “turbulência 3D” (DELTARES, 2014a).

O modelo Delft3D dispõe de diferentes formas de computar esses coeficientes (GERRITSEN *et al.*, 2007). A parte 2D está associada com a contribuição dos movimentos horizontais e com as forçantes que não podem ser resolvidas (“escala de turbulência em sub-grade”) pela malha horizontal. A parte 3D é referida com uma turbulência tridimensional e os coeficientes verticais de viscosidade turbulenta e de difusividade turbulenta são computados de acordo com um dos seguintes modelos de turbulência: $k-\varepsilon$, $k-L$, algébrico, e constante.

Os coeficientes horizontais podem ser impostos pelo usuário como constantes ou variando no espaço ou serem computados por um modelo de escala de sub-grade que resolve a turbulência 2D, o HLES (*Horizontal Large Eddy Simulation*) [para mais informações consultar Uittenbogaard e Van Vossen (2003)]. Neste estudo foram utilizados os valores de 12,5 e 10 m²/s para ν_H e D_H , respectivamente, uniformes para todo domínio, não sendo aplicado, portanto, o modelo para “turbulência 2D” e, uma vez que o modelo foi implantado de forma 2D-H, também não se aplica a consideração da “turbulência 3D”.

4.2.1.3 Modelo de Fluxo de Calor

Para calcular o fluxo de calor através da superfície o modelo *Ocean Heat Flux* é aplicado, considerando a umidade relativa, a temperatura do ar e a cobertura de nuvens, podendo computar a radiação e a perda de calor devido à evaporação e à convecção (DELTARES, 2014a).

O modelo foi utilizado adotando valores diários uniformes para a temperatura, umidade relativa e cobertura de nuvens, com profundidade de Secchi de 1,18 m (média local estimada com base nos dados medidos apresentados na seção 4.3.3) e os números de Stanton (c_h) e de Dalton (c_e) fornecidos conforme valores revisados na literatura. O número de Stanton está associado ao coeficiente de transferência que controla o fluxo de calor convectivo, já o número de Dalton está relacionado com o coeficiente de transferência que controla o fluxo de calor evaporativo.

Twigt (2006) realizou uma revisão sobre os números de Stanton e Dalton encontrados na literatura, que apresentam uma larga faixa de ocorrência, o que, segundo o autor, pode ser explicado pela maneira como esses coeficientes são determinados, comparando experimentos empíricos com dados de referência. Na Tabela 3 é apresentada a lista obtida por Twigt (2006), em que deve ser notado que a maioria das fontes descreve estudos realizados em altas latitudes no Hemisfério Norte (América do Norte, Mar do Norte), com exceção dos valores reportados por Kernkamp e Smits (2000) para a modelagem da temperatura do lago Malawi. Estes valores foram os mais próximos dos encontrados por Twigt (2006) em testes de sensibilidade para a temperatura com o modelo Ocean Heat Flux, de $2,1 \times 10^{-3}$, para ambos números no Mar do Sul da China.

Tabela 3: Números de Stanton e de Dalton encontrados na literatura por Twigt (2006).

Fonte	Número de Stanton	Número de Dalton
Gill (1982)	$0,83 \times 10^{-3}$ (estável); $1,1 \times 10^{-3}$ (instável)	$1,5 \times 10^{-3}$
Millar <i>et al.</i> (1999)	$0,79 \times 10^{-3}$ *	$1,5 \times 10^{-3}$
Smith <i>et al.</i> (1996)	$1,1 \times 10^{-3}$ *	$1,32 \times 10^{-3}$ *
Simon <i>et al.</i> (1999)	$1,0 \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-3}$
Emery <i>et al.</i> (2006)	$1,0 \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-3}$
Lane (1989)	Não analisado	$1,33 \times 10^{-3}$ *
De Goede <i>et al.</i> (2000)	$1,45 \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-3}$
Kernkamp e Smits (2000)	$2,255 \times 10^{-3}$	$1,885 \times 10^{-3}$

*Valores encontrados com base em dados atmosféricos anuais médios climatológicos.

Twigt (2006) realizou análises de sensibilidade da temperatura modelada em relação aos números de Stanton e Dalton utilizando o modelo de fluxo de calor *Ocean* do Delft3D-FLOW. Com análise conjunta do desajuste resultante para uma variação de ambos números entre $1,5$ e $2,5 \times 10^{-3}$, foi identificado o valor ótimo de $2,1 \times 10^{-3}$ para o número de Stanton e Dalton.

No presente estudo, foram realizadas simulações com os números de Stanton e Dalton baseados na análise de Twigt (2006) de $2,1 \times 10^{-3}$ e de $2,5 \times 10^{-3}$ (extremo superior) e comparada a média do erro entre os dados de temperatura da água medidos em 23 estações ao longo da Baía de Vitória e os resultados do modelo numérico de cada simulação, para a seleção dos coeficientes que melhor representaram a temperatura da água medida. A base de dados é apresentada na seção 4.3.3.

4.2.1.4 Condições de Contorno

A fim de se resolver o sistema de equações, as seguintes condições de contorno são requeridas: condição de contorno para o fundo e para a superfície livre.

No sistema de coordenadas σ , o fundo e a superfície livre correspondem a planos σ ; portanto, para todo instante de tempo, as velocidades verticais nessas superfícies são dadas conforme a equação (14) (RIJN; WALSTRA, 2003):

$$\omega|_{\sigma=-1} = 0 \quad e \quad \omega|_{\sigma=0} = 0 \quad (14)$$

A fricção é aplicada no fundo segundo a equação (15) (RIJN; WALSTRA, 2003):

$$\frac{v_V}{H} \frac{\partial u}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=-1} = \frac{\tau_{bx}}{\rho} \quad e \quad \frac{v_V}{H} \frac{\partial v}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=-1} = \frac{\tau_{by}}{\rho} \quad (15)$$

Onde τ_{bx} e τ_{by} são as componentes da tensão cisalhante de fundo. Estas incluem os

efeitos da interação onda-corrente.

A fricção devido ao cisalhamento do vento na superfície da água pode ser incluída de maneira similar.

Para as condições de contorno de transporte de massa, os fluxos verticais através da superfície livre e do fundo são nulos (RIJN; WALSTRA, 2003). Ao longo dos contornos fechados (e.g. ao longo da costa) a velocidade é nula (condição de impenetrabilidade e não-deslizamento). Nas fronteiras abertas, um dos seguintes tipos de condições de contorno devem ser especificados: nível da água, velocidade (na direção perpendicular ao contorno), vazão ou Riemann (condição de contorno fracamente reflexiva). As condições do tipo Riemann relacionam as velocidades normais ao contorno e elevações (VERBOOM; SLOB, 1984).

4.2.1.5 Método Numérico

Anteriormente foi abordada a necessidade da solução numérica das equações apresentadas na seção 4.2.1. Os termos das derivadas apresentadas são discretizadas a partir do método numérico de diferenças finitas atrasadas de terceira ordem para as derivadas horizontais e derivadas centradas de segunda ordem para as derivadas verticais. As derivadas espaciais são solucionadas em uma malha computacional do tipo Arakawa-C, onde as componentes da velocidade são calculadas nas faces das células e as variáveis escalares (como elevação da superfície, salinidade, temperatura) são calculadas no centro da grade numérica. Sendo que, todas as derivadas espaciais na direção vertical do fluido são resolvidas nos centros das células. As derivadas temporais são solucionadas a partir do método implícito de direção alternada (ADI). Para a discretização espacial dos termos advectivos horizontais o Delft3D-FLOW permite o uso de três métodos: cíclico (STELLING; LEENDERTSE, 1992), WAQUA (STELLING, 1984) e Flooding (STELLING; LEENDERTSE, 1992). No presente trabalho será utilizado o método cíclico, por ser apropriado para ambientes costeiros (DELTARES, 2014), além de ser considerado computacionalmente eficiente, acurado ao menos até segunda ordem e estável para valores de número de Courant até cerca de 10 (LESSER, 2009).

4.2.2 Implantação do Modelo Hidrodinâmico

Neste trabalho foi implantado um sistema de grades aninhadas retangulares com intuito de levar as informações de grades de menor resolução espacial para outras grades aninhadas, sendo fornecidas condições de contorno de elevação e correntes até o domínio correspondente ao Sistema Estuarino da Ilha de Vitória, denominado aqui domínio SEIV, que inclui a Baía de Vitória. A implantação do sistema de modelagem numérica foi resultado de um trabalho em conjunto entre o presente estudo e Lacerda (2016).

Para a região oceânica foram considerados campos de vento, campos de pressão atmosférica e maré astronômica.

4.2.2.1 Sistema de Grades Aninhadas

Para a simulação hidrodinâmica, foi implantado um sistema de grades aninhadas realizando um incremento da resolução espacial de três vezes a cada domínio: L1 - $1/12^\circ$, L2 - $1/36^\circ$, L3 - $1/108^\circ$; e SEIV – resolução variável entre 4 e 270 m com malha curvilínea ortogonal (Figura 4, Figura 5 e Tabela 4). Na vertical é utilizada uma malha em coordenadas σ com uma camada, modelo bidimensional integrado na vertical (2DH).



Figura 4: Sistema de grades aninhadas utilizado na modelagem hidrodinâmica.

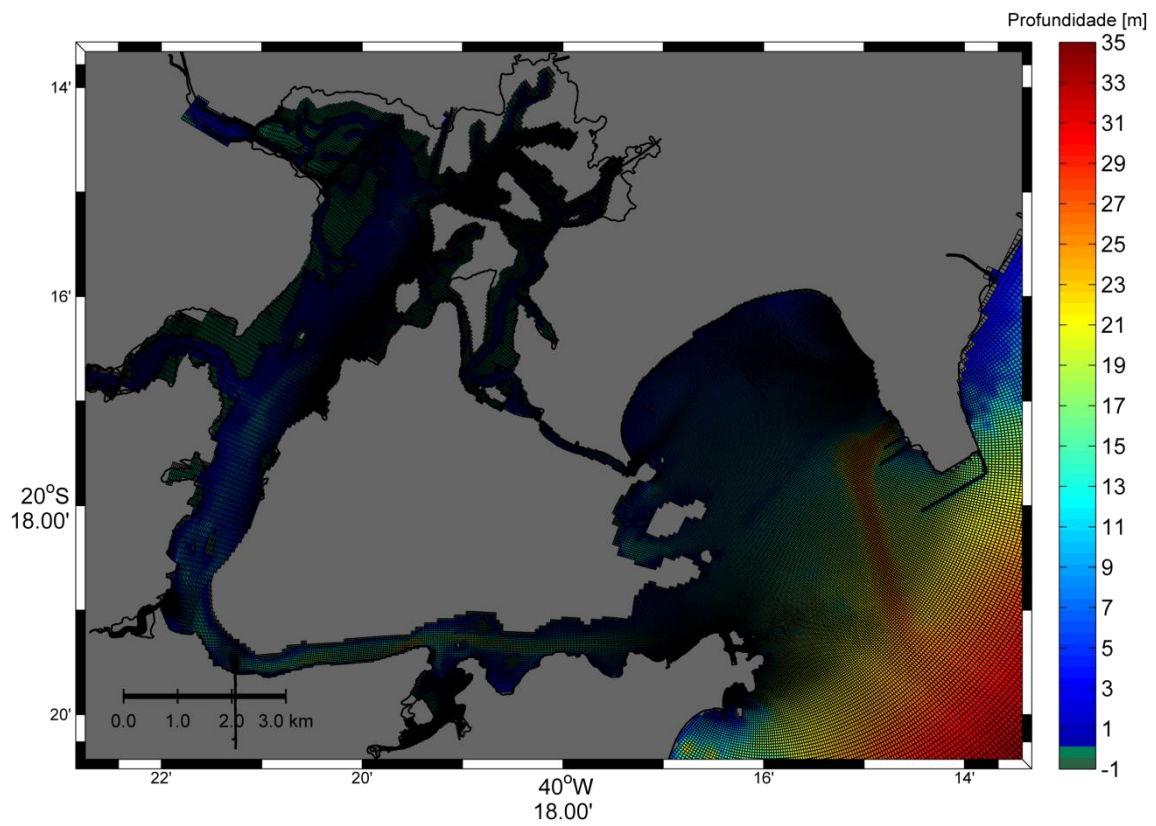


Figura 5: Grade computacional do domínio SEIV sobreposta à batimetria.

Tabela 4: Características do sistema de grades aninhadas utilizado.

Domínio	Coordenadas Geográficas (graus decimais)		Resolução horizontal da grade
	Latitude	Longitude	
L1	-46,004990	-67,683432	1/12°
	-11,107052	-17,988139	
L2	-21,966058	-40,998266	1/36°
	-16,906462	-35,049066	
L3	-20,793688	-40,582035	1/108°
	-19,891591	-39,484633	
SEIV	-20,391339	-40,249387	Variável (4 – 270m)
	-20,217141	-40,203001	

Nos contornos abertos foram utilizadas condições de contorno de Riemann (VERBOOM; SLOB, 1984), sendo essas baseadas no método das características. Nas condições de Riemann os dados de elevação e velocidade são utilizados no cálculo das chamadas invariantes de Riemann, equação (16), sendo essas impostas ao longo de cada seção do contorno aberto, para cada camada vertical.

$$R = U \pm \eta \sqrt{\frac{g}{h}} \quad (16)$$

onde U corresponde à velocidade normal ao contorno, η à elevação da superfície, g à aceleração da gravidade, e h é a profundidade medida a partir do nível médio.

Os dados de elevação da superfície e de velocidade normal ao contorno foram obtidos por meio de um aninhamento do domínio menor (*e.g.* L2) ao domínio maior (*e.g.* L1), com excessão do domínio L1. No domínio L1 os dados de entrada de elevação foram calculados com base em treze (13) harmônicos de maré (*i.e.* M2, S2, N2, K1, O1, Q1, Mf, Mm, M4, MS4, MN4). Os valores de amplitude e fase utilizados são provenientes do modelo global de maré TPXO (EGBERT; EROFEEVA, 2002), fornecidos em uma resolução de 1/4 de grau e interpolados para cada elemento de contorno aberto da grade do domínio L1. As séries de elevação e corrente aninhadas para os próximos domínios (L2, L3 e SEIV) são resultantes da maré astronômica e de forçantes atmosféricas.

Para todos os domínios foram definidas condições iniciais do tipo partida a frio para elevação da superfície e velocidades, ou seja, o modelo foi inicializado com elevação máxima (SEIV) ou zero (L1-L3) e velocidade nula.

O fluxo da quantidade de movimento entre oceano e atmosfera foi parametrizado através da lei quadrática para a velocidade do vento, em que o coeficiente de fricção é calculado a partir da formulação de Large & Pond (1981) para os domínios L1, L2 e L3

e da formulação de Smith e Banke (1975) para o domínio SEIV. Para esses cálculos foram utilizados dados das componentes x e y da velocidade do vento e da pressão atmosférica disponibilizados pelas reanálises-II do NCEP (NCEP2), com resolução temporal de 6h e espacial de 2,5°.

Os dados de batimetria utilizados nos domínios L1, L2 e L3 foram interpolados para a malha computacional a partir de dados de batimetria global GEBCO08, com resolução espacial de 30 segundos, disponível em <http://www.gebco.net/>, e dados digitalizados de cartas náuticas (n° 1400, 1402 e 1403) disponibilizadas pelo DHN (Diretoria de Hidrografia e Navegação da Marinha do Brasil).

4.2.2.2 Batimetria e Altimetria do Sistema Estuarino da Ilha de Vitória

A inserção dos valores das profundidades e das altimetrias do SEIV foi realizada pelo uso do modelo digital de terreno cedido pelo Laboratório de Simulação de Escoamento com Superfície Livre (LABESUL), gerado através da compilação de uma série de dados, dentre os quais podemos citar digitalização de Cartas Náuticas (1401 da 8ª edição da Marinha do Brasil), levantamento batimétrico dos canais (RIGO, 2001) e levantamento altimétrico na região de manguezal (Figura 6). Além disso, nesse modelo foram utilizadas ortofotos para confecção e atualização da linha de costa (NASCIMENTO, 2013). Os canais de acesso ao Porto de Vitória e ao Porto de Tubarão foram atualizados, utilizando dados cedidos pelo Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA) de levantamentos realizados em 2011 (Figura 7).

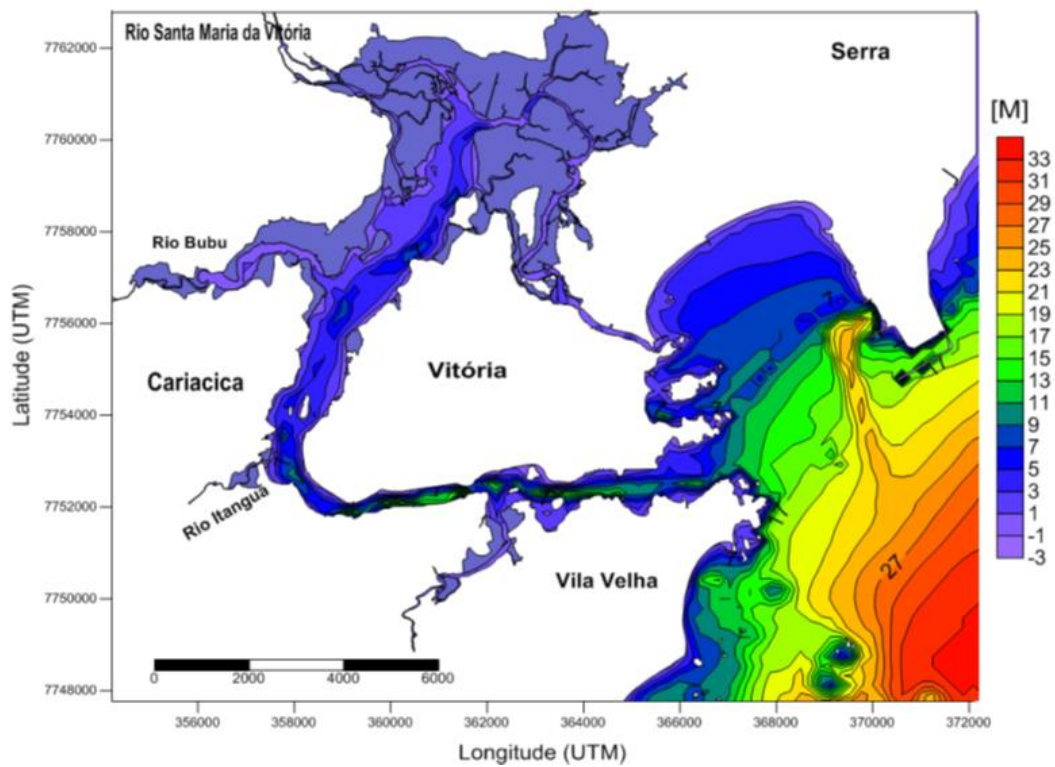


Figura 6: Modelo digital de terreno da região de estudo. Fonte: Nascimento (2013)

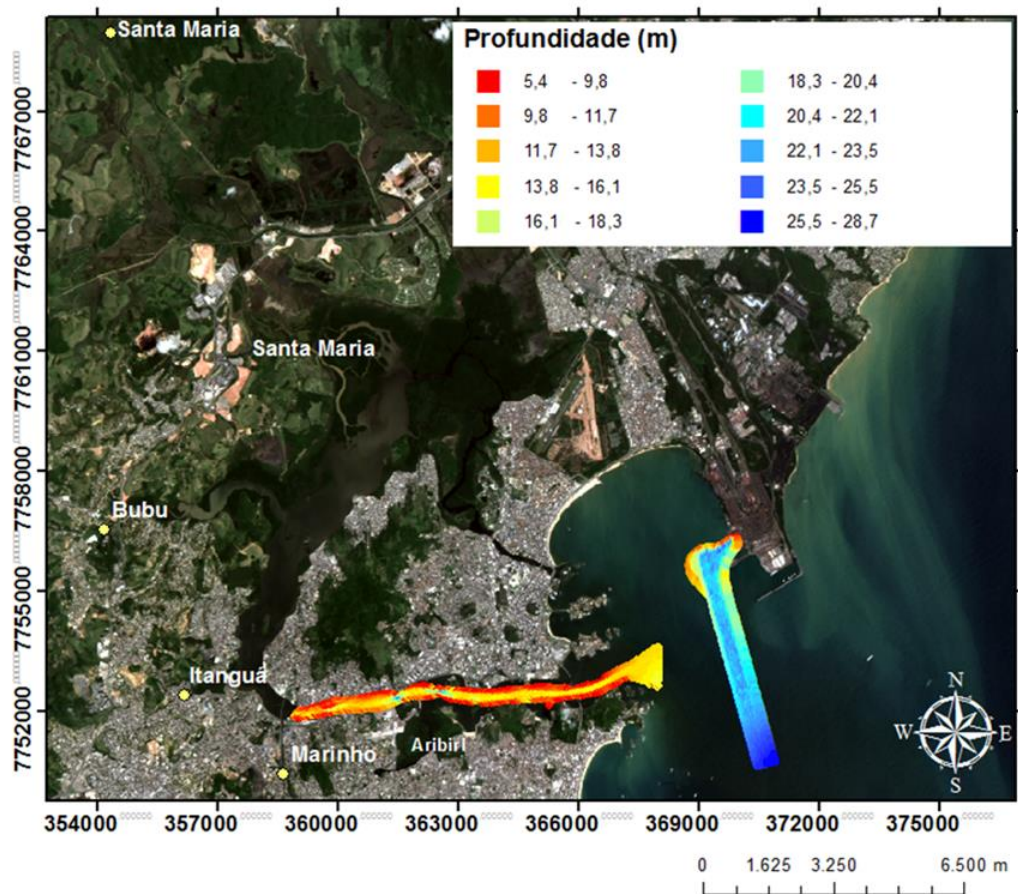


Figura 7: Batimetria dos canais de acesso ao Porto de Vitória e ao Porto de Tubarão.

4.2.2.3 Rugosidade de Fundo

Para definir o valor de rugosidade do fundo no domínio SEIV foi utilizado um preditor de rugosidade baseado em van Rijn (2007), no qual a altura da rugosidade é computada, variando no espaço e no tempo, com base na composição do fundo, campo de velocidades e de ondas (quando consideradas). A distribuição da mediana do diâmetro do sedimento de fundo na área de estudo foi definida nos trabalhos de D'Agostini (2005) e Brant (2012).

4.2.2.4 Condições Iniciais e Condições de Contorno do Domínio SEIV

As condições iniciais de velocidade e a elevação foram consideradas nulas (partida a frio) e para a temperatura e salinidade foram adotados os valores constantes de 24°C e 36, respectivamente. Estes valores foram baseados nos dados apresentados por Oliveira (2006), extraídos dos relatórios trimestrais do Programa de Monitoramento Ambiental da CVRD realizado no período de 2000 a 2005, através da mediana obtida para o ponto E15 localizado na Baía do Espírito Santo, mais próximo ao contorno do SEIV.

Como condição de contorno na região oceânica, foram impostas as informações do domínio maior conforme descrito na seção 4.2.2.1. Para o contorno aberto oceânico os dados de temperatura e salinidade foram obtidos a partir das reanálises HYCOM/NCODA. As reanálises HYCOM/NCODA correspondem à resultados obtidos a partir do modelo hidrodinâmico HYCOM (*HYbrid Coordinate Ocean Model*) com assimilações de dados, de altimetria e temperatura de sensores remotos e temperatura e salinidade de medidas *in situ*, a partir do sistema NCODA (*Navy Coupled Ocean Data Assimilation*). Os resultados são distribuídos em uma grade uniforme com resolução horizontal de 0.08°, entre 80.48°S and 80.48°N, e resolução vertical de 40 camadas (z). As reanálises são disponibilizadas para o período entre 1992 e 2012, cobrindo todo o período simulado. Os dados e maiores informações são disponibilizados no site do modelo: *hycom.org*.

Os dados diários de salinidade e temperatura HYCOM/NCODA foram interpolados na horizontal para o ponto central do contorno aberto e o valor médio das 15 primeiras camadas (0-50 m) foi utilizado para definir a condição de contorno do domínio SEIV. Os dados diários são interpolados linearmente para cada passo de tempo de simulação. Assim, os dados são inseridos de maneira uniforme ao longo de todo o contorno aberto

oceânico, mas variando o valor a cada passo de tempo.

Na região interna ao SEIV, as condições de contorno para a modelagem hidrodinâmica foram as descargas provenientes dos principais tributários: rios Santa Maria da Vitória, Bubu, Aribiri e Marinho; e dados de vento local.

Para o fluxo de energia na interface oceano/atmosfera foi utilizado o modelo *Ocean* incluído no Delft3D-FLOW. Para o fechamento do modelo de turbulência será utilizado o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ para o cálculo da turbulência 3D e o modelo HLES (*Horizontal Large Eddy Simulation*) para o cálculo da turbulência 2D.

Os dados de vento local foram provenientes da estação meteorológica de Vitória (ES, OMM: 83648) do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET), localizada em 40,31° O e 20,31° S, próximo a Baía de Vitória. Os dados são disponibilizados em um intervalo de 12h, os quais foram interpolados no tempo e considerados uniformes para todo o domínio.

Os dados de vazões utilizados para os tributários foram compilados a partir dados disponíveis em HidroWeb (2014), Sistema de Informações Hidrológicas da Agência Nacional de Águas (ANA), e dados fornecidos pelo Instituto Estadual de Meio Ambiente (IEMA) pertencentes ao Monitoramento Ambiental das Obras de Dragagem de Aprofundamento e de Derrocagem do Canal de Acesso, Bacia de Evolução e Berços de Atracação do Porto de Vitória-ES, realizado entre os anos 2011 e 2013.

São disponibilizadas no HidroWeb as médias das vazões diárias do Rio Santa Maria da Vitória, medidas na estação fluviométrica Santa Leopoldina, as quais foram interpoladas linearmente no tempo para o período de simulação, sendo apresentados na Figura 8 os valores de vazão dos meses de maio e junho de 2013. Este período é referente à simulação hidrodinâmica utilizada como base para a modelagem da qualidade da água (detalhamento na seção 4.3.8). Nesse período, a vazão do Rio Santa Maria da Vitória esteve predominantemente acima da vazão média histórica anual de 13,7 m³/s, calculada por Nascimento (2013) a partir dos dados da estação Santa Leopoldina.

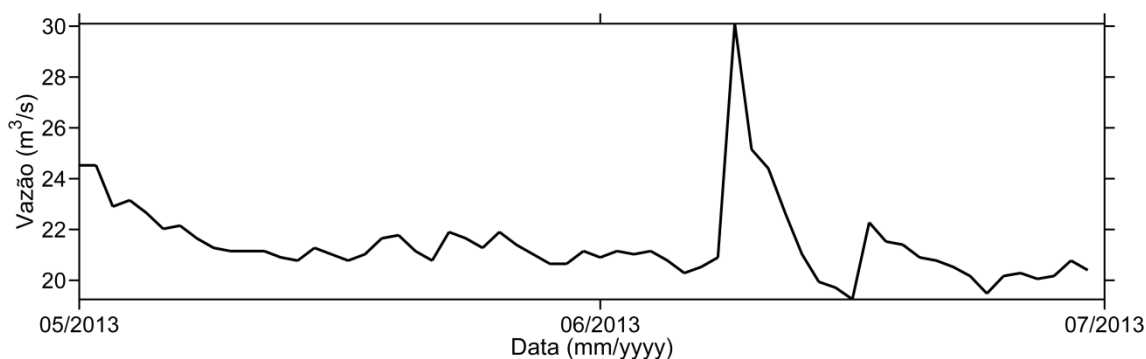


Figura 8: Médias das vazões diárias do Rio Santa Maria da Vitória para o período de maio a junho de 2013 medidas na estação Santa Leopoldina.

As vazões dos demais tributários utilizadas fornecidas pelo IEMA foram adquiridas entre 26/02 e 01/03/2013, sendo adotados os valores constantes ao longo de todo período de simulação. Estes valores estão apresentados na Tabela 5.

Tabela 5: Vazões médias dos pequenos tributários da Baía de Vitória. Os valores foram obtidos ao longo de um ciclo de maré de sizígia.

Tributário	Data	Vazão média (m³/s)
Bubu	26/02/2013	0,609
Marinho	27/02/2013	0,07
Aribiri	01/03/2013	0,416

Na ausência de dados medidos de vazão disponíveis para o rio Itanguá, este não foi considerado como contorno aberto do modelo hidrodinâmico.

4.2.3 Verificação da Modelagem Hidrodinâmica

Os resultados do modelo foram comparados com dados de correntes medidos na região da Terceira Ponte, próximo à desembocadura da Baía de Vitória, e dados de elevação medidos no Porto de Tubarão, adquiridos nas campanhas realizadas no canal de acesso ao porto no mês de abril de 1999, sendo os mesmos dados utilizados por Rigo (2004), Nascimento (2013). O registro de elevação da água foi realizado através de um marégrafo, modelo Global Water WL 300 e as correntes foram medidas através do correntógrafo Sensordata SD 600 (precisão de $\pm 0,5$ cm/s), fundeado a 60% da profundidade (NASCIMENTO, 2013).

As comparações entre as séries medidas e modeladas foram realizadas com base no cálculo dos seguintes parâmetros estatísticos: coeficiente de correlação de Pearson (r)

apresentado na equação (17); erro absoluto médio (MAE – *Mean Absolut Error*) apresentado na equação (18); Erro Médio Quadrático, ou como definido na literatura inglesa Root Mean Square Error – RMSE ou RMS apresentado na equação (19); e índice de concordância de Wilmott (Id) apresentado na equação (20) (WILMOTT, 1981).

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P})(O_i - \bar{O})}{(n-1)S_P S_O} \quad (17)$$

$$MAE = \left[n^{-1} \sum_{i=1}^n |P_i - O_i| \right] \quad (18)$$

$$RMS = \left[n^{-1} \sum_{i=1}^n [P_i - O_i]^2 \right]^{1/2} \quad (19)$$

$$Id = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n |P_i - O_i|^2}{\sum_{i=1}^n (|P_i - \bar{P}|^2 + |O_i - \bar{O}|^2)} \quad (20)$$

Onde P_i é o valor modelado para cada tempo i ; O_i é o valor medido para cada tempo i ; n é a quantidade de dados; S_P é o desvio padrão dos valores modelados P_i ; S_O é o desvio padrão dos valores medidos O_i .

O coeficiente de correlação de Pearson (r) mede o grau da correlação (e a direção dessa correlação - se positiva ou negativa) entre duas variáveis. O erro absoluto médio (MAE) não é tão utilizado na literatura como o RMS, apesar de ser útil para uma identificação da diferença média entre o dado estimado e o que se considera como referência. O RMS fornece um resultado sempre maior que o MAE, assim como observado nos resultados obtidos, o que ocorre em função da própria formulação do RMS, como discutido por Wilmott e Matsuura (2005). O Id mede a capacidade do modelo de reproduzir os dados medidos em campo. Seus valores podem variar de 0 a 1, de modo que quando igual a 1, os dados estão em perfeita concordância.

4.2.4 Modelagem Hidrodinâmica do SEIV

Após a verificação dos resultados obtidos pelo modelo Delft3D-FLOW, foi simulada a hidrodinâmica referente ao período de 15/04/2013 a 01/07/2013, que serviu de base para a modelagem da qualidade da água (detalhamento sobre o período de simulação é apresentado em 4.3.8).

4.3 MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA

4.3.1 Módulo D-Water Quality (Delft3D)

4.3.1.1 Modelo Conceitual e Modelo Matemático

O modelo de conservação de massa administra o balanço de massa para as variáveis de estado em cada célula computacional. A cada passo de tempo, entre o tempo t e $(t + \Delta t)$ é resolvida a equação de advecção-difusão-reação para cada célula computacional e cada variável de estado. O balanço de massa é apresentado na equação (21) de forma simplificada, a seguir (DELTARES, 2014b):

$$M_i^{t+\Delta t} = M_i^t + \Delta t \times \left(\frac{\Delta M}{\Delta t}\right)_{Tr} + \Delta t \times \left(\frac{\Delta M}{\Delta t}\right)_{PF} + \Delta t \times \left(\frac{\Delta M}{\Delta t}\right)_S \quad (21)$$

onde M_i^t é a massa no início do passo de tempo; $M_i^{t+\Delta t}$ é a massa no final do passo de tempo; $\left(\frac{\Delta M}{\Delta t}\right)_{Tr}$ é a variação de massa no tempo devido ao transporte; $\left(\frac{\Delta M}{\Delta t}\right)_{PF}$ é a variação de massa no tempo devido aos processos físicos (por exemplo, reaeração e deposição), bioquímicos ou biológicos; e $\left(\frac{\Delta M}{\Delta t}\right)_S$ é a variação de massa devido às fontes, como descargas de resíduos e fluviais. As variações devido ao transporte incluem tanto o transporte advectivo quanto o dispersivo, que são o transporte pelo escoamento e transporte resultante de diferenças de concentração, respectivamente; as variações devido aos processos incluem processos físicos, bioquímicos e biológicos; e as variações devido às fontes incluem a adição de massa por cargas de resíduos e na extração de massa por consumo (DELTARES, 2014b).

4.3.1.2 Método Numérico

O módulo D-Water Quality resolve o transporte de água e constituintes e as reações através do método de volumes finitos. A discretização no tempo é explícita, implícita ou semi-implícita (DELTARES, 2014b). O modelo permite o uso de diferentes esquemas numéricos nas direções horizontal e vertical. A discretização no tempo dos termos de reação e termos fonte é sempre tratada de forma explícita no modelo, o que permite o tratamento de equações que representem reações complexas e não-lineares (DELTARES, 2014b).

4.3.1.3 Constituintes e Processos Disponíveis

No módulo D-Water Quality os constituintes podem ser divididos em grupos funcionais que incluem uma ou mais substâncias que demonstram comportamento físico e/ou bioquímico semelhante (DELTARES, 2014b) (Figura 9).

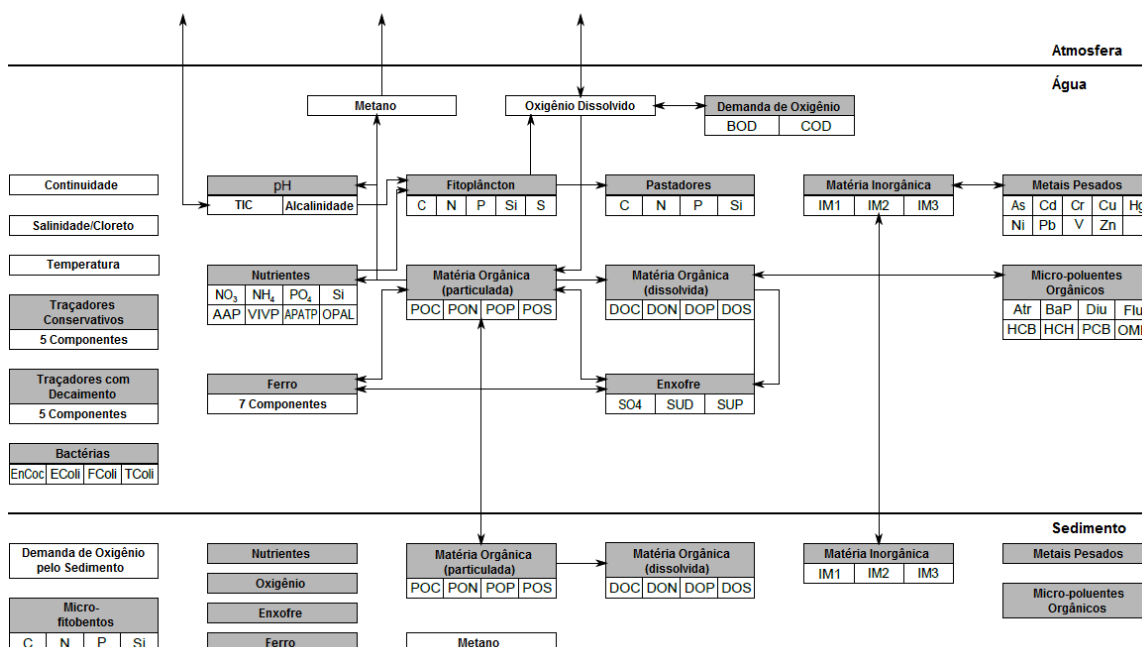


Figura 9: Visão geral dos constituintes incluídos no módulo D-Water Quality do modelo Delft3D. Os constituintes são apresentados em grupos funcionais em cinza e as principais relações são indicadas pelas setas; algumas estão omitidas. Siglas: BOD – demanda bioquímica de oxigênio; COD – demanda química de oxigênio; PO – orgânico(a) particulado(a); DO - orgânico(a) dissolvido(a); TIC - carbono inorgânico total; IM – matéria inorgânica suspensa (frações 1, 2 e 3); AAP – fosfato adsorvido; VIVP – fósforo como vivianita; APATP – fósforo como apatita; OPAL – sílica opalina; SUD – sulfeto dissolvido; SUP – sulfeto precipitado; Atr – atrazina; BaP - benzo-a-pireno; Diu – diuron; Flu – fluoranteno; HCB – hexaclorobenzeno; HCH – hexaclorohexano; PCB – bifenilas policloradas; OMP – micro-poluentes orgânicos (geral); EnCoc – Enterococos; EColi – *Escherichia coli*; FColi – coliformes fecais; TColi – coliformes totais. Fonte: Modificado de Deltares (2014b)

Podem ser especificados diversos processos físicos, (bio)químicos e biológicos como: sedimentação e ressuspensão; reaeração de oxigênio; crescimento e mortalidade de algas; mineralização da matéria orgânica; nitrificação e desnitrificação; adsorção e precipitação de fosfato e fracionamento de metais pesados (adsorção e precipitação); fracionamento, degradação e volatilização de micro-poluentes orgânicos; e mortalidade de bactérias (DELTARES, 2014b).

4.3.1.4 Tipos de Condições de Contorno

Os contornos são definidos no modelo hidrodinâmico e não precisam ser redefinidos. Podem ser contornos fechados, onde o escoamento e a dispersão são iguais a zero, ou

contornos abertos. As concentrações de todos os constituintes e coeficientes de dispersão serão especificados em todos contornos abertos para todos passos de tempo. O escoamento será automaticamente extraído do modelo hidrodinâmico. O modelo possibilita utilizar o esquema de advecção *upwind* localmente no contorno e suprimir o transporte dispersivo neste. A utilização de uma discretização espacial *upwind* nos contornos permite a transferência das condições de contorno de acordo com a direção do escoamento local instantâneo (DELTARES, 2014b). Se a água atravessa os limites, pode ser assumido que a concentração imediatamente fora da área modelada é influenciada pelas saídas anteriores. Se a mudança do escoamento ocorre novamente, como em estuários, pode ser assumido que parte da água que saiu pode entrar novamente. O modelo é capaz de utilizar uma função cosseno a partir da última concentração de saída para a condição de contorno especificada, através do tempo de atraso Thatcher-Harleman, que usa a concentração interior se a saída acontece e inicia com a concentração mais recente de saída dentro do atraso especificado pelo usuário conforme as características hidrodinâmicas do ambiente. Para estuários, este tempo é tipicamente da ordem de uma a seis horas, dependendo do ciclo de maré.

4.3.1.5 Balanço de Oxigênio Dissolvido-DBO

O balanço de oxigênio dissolvido e Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) é realizado pelo módulo D-Water Quality conforme o balanço de massa apresentado nas equações (22) e (23) (DELTARES, 2014b):

$$\frac{\Delta O_2}{\Delta t} = \text{cargas} + \text{transporte} + \text{reaeração} + \text{produção primária líquida} - \text{mineralização} - \text{nitrificação} - \text{desnitrificação} \quad (22)$$

e

$$\frac{\Delta DBO}{\Delta t} = \text{cargas} + \text{transporte} - \text{deposição} - \text{mineralização}. \quad (23)$$

A mineralização da matéria orgânica pode ser modelada de acordo com a origem do material: (i) proveniente de águas residuais; (ii) proveniente de detritos de carbono orgânico derivados de fontes naturais como a morte de fitoplâncton; e (iii) considerando ambas origens.

Neste trabalho foi considerada apenas a primeira opção, considerando a representação do Modelo de Streeter-Phelps, baseado nas formulações matemáticas utilizadas para o cálculo do oxigênio dissolvido a partir do lançamento de matéria orgânica em um corpo

hídrico (STREETER, PHELPS, 1925).

Para o oxigênio dissolvido, os processos modelados contemplaram as cargas, o transporte (a partir da modelagem hidrodinâmica), a reaeração, a oxidação da matéria orgânica (mineralização) e a nitrificação. Para a DBO foram consideradas as cargas e os processos de transporte e a mineralização.

Por ausência de dados disponíveis, não foram considerados os processos de produção primária líquida ou fotossíntese (adição de oxigênio dissolvido) e deposição (remoção de DBO). Pelo mesmo motivo, não é considerado consumo de oxigênio devido à demanda de oxigênio pelo sedimento.

A oxidação da matéria orgânica é computada como um processo linear de decaimento dependente do oxigênio e da temperatura, dado pela equação (24):

$$\text{Fluxo de mineralização} = -R_{c_{DBO}} \times (c_{DBO5}) \times \vartheta_{DBO}^{(T-20)} \times \frac{(O_2) - OD_{DBO}^{Cr}}{OD_{DBO}^{Ot} - OD_{DBO}^{Cr}} \quad (24)$$

onde $R_{c_{DBO}}$ é a constante da taxa de mineralização de primeira ordem a 20°C [d⁻¹]; c_{DBO5} é a concentração da DBO5 carbonácea [gO₂ m⁻³]; ϑ_{DBO} é o coeficiente de temperatura; T é a temperatura da água [°C]; O_2 é a concentração de oxigênio dissolvido [gO₂ m⁻³]; OD_{DBO}^{Cr} é a concentração crítica de oxigênio dissolvido para a mineralização [gO₂ m⁻³]; e OD_{DBO}^{Ot} é a concentração ótima de oxigênio dissolvido para a mineralização [gO₂ m⁻³].

O processo de nitrificação é também formulado linearmente dependente da temperatura e do oxigênio, conforme demonstrado na equação (25):

$$\text{Fluxo de nitrificação} = -R_{c_{nit}} \times (NH_4) \times \vartheta_{nit}^{(T-20)} \times \frac{(O_2) - OD_{nit}^{Cr}}{OD_{nit}^{Ot} - OD_{nit}^{Cr}} \quad (25)$$

onde $R_{c_{nit}}$ é a constante da taxa de nitrificação de primeira ordem a 20°C [d⁻¹]; NH_4 é a concentração de amônio [gN m⁻³]; ϑ_{nit} é o coeficiente de temperatura; T é a temperatura da água [°C]; O_2 é a concentração de oxigênio dissolvido [gO₂ m⁻³]; OD_{nit}^{Cr} é a concentração crítica de oxigênio dissolvido para a nitrificação [gO₂ m⁻³]; e OD_{nit}^{Ot} é a concentração ótima de oxigênio dissolvido para a nitrificação [gO₂ m⁻³].

O cálculo do fluxo de reaeração pelo modelo é mostrado na equação (26):

$$\text{Fluxo de reaeração} = R_{c_{rear}} \times (OD_{sat} - (O_2)) \times \vartheta_{rear}^{(T-20)} \quad (26)$$

onde $R_{c_{rear}}$ é a constante da taxa de reaeração de primeira ordem, em que $R_{c_{rear}} = f(\text{velocidade do vento, velocidade do escoamento, profundidade})$; OD_{sat} é a concentração de saturação de oxigênio dissolvido, em que $OD_{sat} = f(T, \text{salinidade})$; O_2 é concentração de oxigênio dissolvido; ϑ_{rear} é coeficiente de temperatura para

reaeração; e T é a temperatura da água.

A taxa de reaeração (Rc_{rear}) é formulada como uma função linear em que o coeficiente de transferência de massa depende da temperatura e da diferença entre a concentração de saturação e a concentração atual de oxigênio dissolvido, conforme mostrado nas equações (27), (28), (29), (30) e (31):

$$Rc_{rear} = kl_{rear} \times (C_{oxs} - \max(C_{ox}, 0.0))/H \quad (27)$$

$$kl_{rear} = kl_{rear}^{20} \times kt_{rear}^{(T-20)} \quad (28)$$

$$kl_{rear}^{20} = \left(\frac{a \times V^b}{H^c} \right) + (d \times W^2) \quad (29)$$

$$C_{oxs} = f(T, \text{salinidade}) \quad (30)$$

$$f_{sat} = 100 \times \frac{\max(C_{ox}, 0.0)}{C_{oxs}} \quad (31)$$

onde a , b , c e d são os coeficientes da formulação para reaeração; C_{ox} é a concentração atual de oxigênio dissolvido [$\text{gO}_2 \text{ m}^{-3}$]; C_{oxs} é a concentração de saturação de oxigênio dissolvido [$\text{gO}_2 \text{ m}^{-3}$]; f_{sat} é o percentual de saturação [%]; H é a profundidade da coluna d'água [m]; kl_{rear} é o coeficiente de transferência de reaeração na água [m d^{-1}]; kl_{rear}^{20} é o coeficiente de transferência de reaeração na temperatura de referência 20°C [m d^{-1}]; kt_{rear} é o coeficiente de temperatura para o coeficiente de transferência; Rc_{rear} é a taxa de reaeração [$\text{gO}_2 \text{ m}^{-3} \text{ d}^{-1}$]; T é a temperatura [$^\circ\text{C}$], V é a velocidade do escoamento [m s^{-1}]; W é a magnitude da velocidade do vento a 10 metros [m s^{-1}].

A taxa de reaeração (Rc_{rear}) também está em função da formulação para a reaeração, sendo utilizada neste trabalho uma formulação de acordo com O'Connor e Dobbins (1956) e Banks e Herrera (1977), como reportado por WL | Delft Hydraulics (1980), mas com coeficientes a , b , c e d modificados conforme WL | Delft Hydraulics (1978). Segundo Deltares (2014b), essa formulação é válida para estuários. Os valores dos coeficientes são (DELTARES, 2014b): $a = 3,863$; $b = 0,5$; $c = 0,5$; e $d = 0,065 \times kl_{rear}^{20}$.

4.3.1.6 Amônia Livre ou Amônia Não Ionizada (NH_3)

A amônia livre ou amônia não ionizada (NH_3) é o produto da dissociação do íon amônio (NH_4^+): $\text{NH}_4^+ \longrightarrow \text{NH}_3 + \text{H}^+$.

A reação é caracterizada por uma constante de equilíbrio dada em função da força iônica da solução, temperatura e pressão.

Uma das opções disponibilizadas pelo modelo Delft3D para a determinação de NH_3 ,

adotada neste trabalho, é o cálculo da constante de dissociação como uma função da salinidade e temperatura de acordo com Millero (1995). Essa formulação exige também o fornecimento do pH da água, obtido a partir da base de dados de análises físico-químicas de amostras de água da Baía de Vitória, apresentada na seção 4.3.3.1. Como os valores de pH medidos em diferentes momentos ao longo do dia não demonstraram significativa diferença (média = 7,81; desvio padrão = 0,19), foi adotado no cálculo da amônia livre um valor constante de pH referente a média dos dados observados.

4.3.1.7 Temperatura e Taxas de Reação

A temperatura da água determina a taxa em que os processos acontecerão, sendo importante que esta característica esteja corretamente especificada. A dependência das taxas de reação da temperatura é apresentada na equação (32) (DELTARES, 2014b):

$$k = k^{20} \times k_T^{(T-20)} \quad (32)$$

onde k é a constante da taxa de reação na temperatura T [d^{-1}], k^{20} é a constante da taxa na temperatura de referência $20^{\circ}C$ [d^{-1}], k_T é o coeficiente de temperatura [-] e T é a temperatura ambiente da água [$^{\circ}C$].

4.3.2 Domínio e Grade Computacional

O domínio computacional para a modelagem da qualidade da água compreendeu a Baía de Vitória e Baía do Espírito Santo. Para a modelagem dos constituintes, o corpo hídrico foi dividido em células computacionais tridimensionais, sendo a grade computacional derivada do modelo hidrodinâmico (Delft3D-FLOW), a partir da conversão da malha de elementos finitos utilizada pelo módulo FLOW para a malha de volumes finitos requerida pelo módulo D-Water Quality.

4.3.3 Base de Dados

4.3.3.1 Análises Físico-Químicas da Água da Baía de Vitória e de seus Principais Tributários

No modelo de qualidade da água foram utilizados dados de análises físico-químicas de amostras de água da Baía de Vitória, cedidos pelo IEMA. Os dados de vinte e três

pontos da Baía de Vitória (P-01 a P-23), de superfície e fundo foram adquiridos entre os anos 2011 e 2013 (Tabela 6). Entre os parâmetros contemplados no monitoramento estão: condutividade, salinidade, transparência, total de sólidos dissolvidos, oxigênio dissolvido, potencial de oxidação-redução (ORP), material em suspensão, turbidez, coliformes termotolerantes, nitratos, nitritos, nitrogênio amoniacal total, orto-fosfato e pH.

Tabela 6: Datas de aquisição de dados de qualidade da água da Baía de Vitória.

Campanha	Periodicidade	Data de execução
1 ^a	Prévia à dragagem	13/06/2012
2 ^a	25% de dragagem	12/10/2012
3 ^a	50% de dragagem	22 a 31/01/13
4 ^a	75% de dragagem	25 a 29/06/2013

Também foram utilizados dados de análises físico-químicas de amostras de água dos principais tributários da Baía de Vitória, cedidos pela Agência Estadual de Recursos Hídricos (AGERH). Os dados dos cinco tributários (rio Santa Maria da Vitória, rio Bubu, rio Itanguá, rio Aribiri e rio Marinho) são provenientes do Monitoramento Qualitativo das Bacias Hidrográficas do rio Santa Maria da Vitória e do rio Jucu (Tabela 7). Entre os dados analisados no monitoramento estão: condutividade, salinidade, clorofila a, nitrogênio amoniacal, nitrogênio Kjeldahl, nitrogênio total, nitrogênio-nitrato, nitrogênio-nitrito, DQO, DBO, fósforo total, oxigênio dissolvido, material em suspensão, sólidos dissolvidos, temperatura, turbidez, pH e coliformes. A localização dos pontos de coleta de dados está apresentada na Figura 10.

Tabela 7: Datas de aquisição de dados de qualidade da água dos tributários: rio Santa Maria da Vitória (SMV1C020), rio Bubu (BUB1C010), rio Itanguá (ITG1C002), rio Aribiri (ARI1C001) e rio Marinho (MAR1C020).

Campanha	Data de Coleta por Ponto				
	SMV1C020	BUB1C010	ITG1C002	ARI1C001	MAR1C020
1ª/2009	20/05/2009	19/05/2009	02/04/2009	02/04/2009	02/04/2009
2ª/2009	08/07/2009	24/06/2009	16/07/2009	16/07/2009	16/07/2009
3ª/2009	26/08/2009	19/08/2009	12/08/2009	12/08/2009	12/08/2009
4ª/2009	11/11/2009	09/11/2009	09/11/2009	09/11/2009	09/11/2009
1ª/2010	-	04/03/2010	04/04/2010	07/04/2010	07/04/2010
2ª/2010	05/08/2010	07/06/2010	25/05/2010	26/05/2010	26/05/2010
3ª/2010	25/08/2010	27/08/2010	01/09/2010	01/09/2010	01/09/2010
4ª/2010	10/11/2010	27/10/2010	03/11/2010	03/11/2010	03/11/2010
1ª/2011	30/03/2011	31/03/2011	-	-	-
2ª/2011	15/06/2011	18/05/2011	24/05/2011	24/05/2011	24/05/2011
3ª/2011	21/09/2011	03/08/2011	10/08/2011	10/08/2011	10/08/2011
4ª/2011	23/11/2011	-	-	-	-
1ª/2012	04/04/2012	07/03/2012	14/03/2012	14/03/2012	14/03/2012
2ª/2012	13/06/2012	09/05/2012	16/05/2012	16/05/2012	17/05/2012
3ª/2012	05/09/2012	08/08/2012	15/08/2012	15/08/2012	15/08/2012
4ª/2012	10/10/2012	03/10/2012	31/10/2012	31/10/2012	31/10/2012
1ª/2013	04/04/2013	06/03/2013	13/03/2013	13/03/2013	13/03/2013
2ª/2013	13/06/2013	08/05/2013	15/05/2013	15/05/2013	15/05/2013
3ª/2013	04/09/2013	07/08/2013	14/08/2013	14/08/2013	14/08/2013
4ª/2013	21/11/2013	16/10/2013	22/10/2013	22/10/2013	22/10/2013

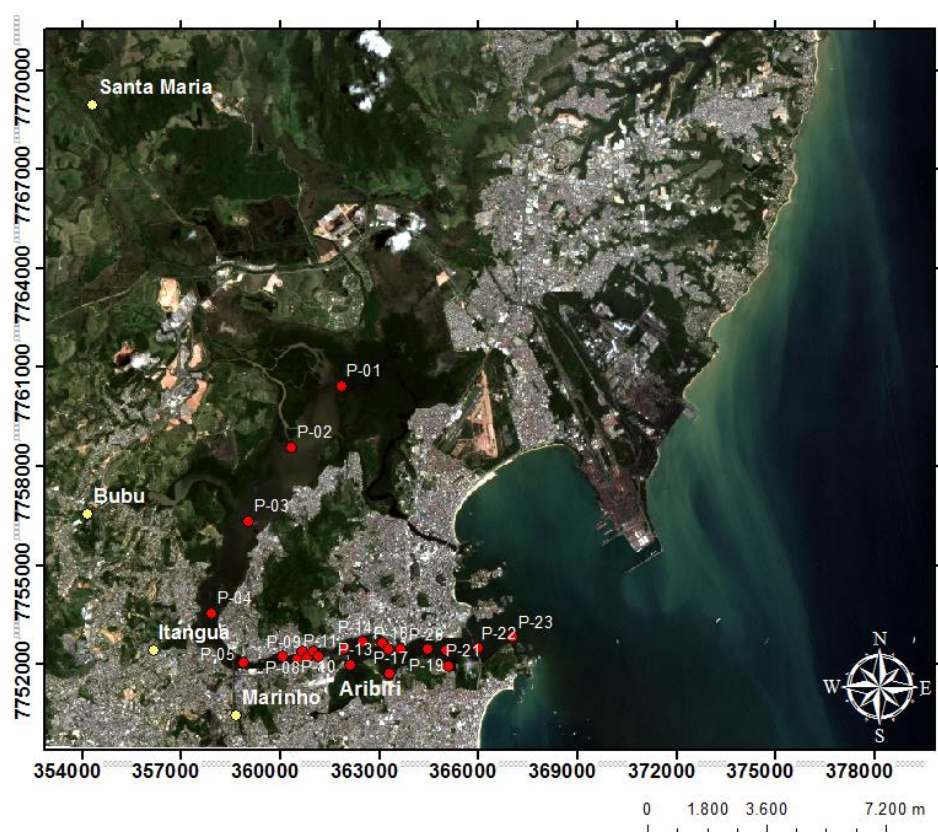


Figura 10: Localização dos pontos de coleta de dados de qualidade da água da Baía de Vitória (P-01 a P-23) e dos tributários: rio Santa Maria da Vitória, rio Bubu, rio Itanguá, rio Aribiri e rio Marinho.

4.3.3.2 Estimativa de Nutrientes provenientes de Fontes Pontuais Urbanas

Foram consideradas as estimativas de cargas de nutrientes (fósforo e nitrogênio amoniacal), calculadas por Moraes (2008) e Cassini (2011) com base em dados populacionais, que podem chegar a Baía de Vitória através de fontes pontuais urbanas, sendo elas: Galeria da EBAP da Cesan, Galeria da Avenida Paulino Muller, Galeria da rua Duarte Ferreira, galerias da região interna da Baía de Vitória, canal afluente à Baía de Vitória, Canal dos Escravos e Canal da Costa (Figura 11).



Figura 11: Localização das fontes extraídas de Cassini (2011): (1) Canal afluente à Baía de Vitória; (2) Canal dos Escravos; (3) Galerias da região interna da Baía de Vitória; (4) Galeria da rua Duarte Ferreira; (5) Galeria da Av. Paulino Muller; (6) Galeria da EBAP da CESAN; (7) Canal da Costa.

Na Tabela 8 são apresentados os valores que equivalem a 55% das cargas estimadas por Moraes (2008), conforme sugerido por Cassini (2011), e as cargas estimadas por Cassini (2011) para as galerias da região interna da Baía de Vitória.

Tabela 8: Cargas de DBO e N-amoniaco estimadas por Morais (2008) e Cassini (2011) para fontes pontuais urbanas.

Fonte	DBO (kg/d)	N-amoniaco (kg/d)
Galeria da EBAP da CESAN	652,2 ^a	54,3 ^a
Galeria da Av. Paulino Muller	353,5 ^a	29,5 ^a
Galeria da rua Duarte Ferreira	196,1 ^a	16,3 ^a
Canal afluente à Baía de Vitória	990,4 ^a	82,5 ^a
Canal dos Escravos	1.080,6 ^a	90,0 ^a
Canal da Costa	4.034,7 ^a	336,2 ^a
Galerias da região interna da Baía de Vitória	1.310,5 ^b	109,2 ^b

^aValores baseados em Morais (2008) e Cassini (2011); ^bvalores baseados em Cassini (2011).

4.3.4 Constituintes e Processos

Foram considerados os seguintes constituintes na coluna d'água que participam do balanço de oxigênio dissolvido: compostos de nitrogênio, sendo eles íon amônio (NH_4^+), amônia livre ou não ionizada (NH_3) e nitrato (NO_3^-); Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO5); e oxigênio dissolvido (OD).

Os processos de qualidade da água foram ativados conforme os constituintes ou grupo de constituintes simulados, de modo a fechar o balanço de massa e resolver a equação de advecção-difusão-reação, levando em conta também os dados de entrada disponíveis. Foram considerados os seguintes processos: oxidação da matéria orgânica (mineralização), reaeração e nitrificação.

Importantes processos que participam do balanço de oxigênio dissolvido, como a fotossíntese, não puderam ser considerados devido à ausência de dados para a região.

O processo de seleção dos coeficientes e taxas de reação foi realizado com base na literatura, priorizando estudos de modelagem numérica da qualidade da água realizados para ambientes estuarinos. Foi selecionada a configuração de constantes e taxas de reação que melhor representou o ambiente simulado.

Os valores selecionados durante o processo de seleção estão apresentados na Tabela 9. Para os demais coeficientes, foram utilizados valores padrão do modelo D-Water Quality do Delft3D, os quais podem ser obtidos em Deltares (2014c).

Tabela 9: Variáveis de estado e coeficientes dos processos utilizados no módulo D-Water Quality.

Variável	Descrição	Valor	Unidade	Referência
<i>Mineralização/Oxidação DBO - BODCOD</i>				
RcBOD	Taxa de decaimento da DBO	0,14	1/d	Thomann e Fitzpatrick (1982): 0,14 - 0,16
COXBOD	Concentração crítica de oxigênio para decaimento da DBO	1	gO_2/m^3	Deltares (2014c): 1
OOXBOD	Concentração ótima de oxigênio para decaimento da DBO	5	gO_2/m^3	Deltares (2014c): 5
TcBOD	Coeficiente de temperatura para decaimento da DBO	1,04	-	Deltares (2014c): 1,04
<i>Nitrificação do amônio - Nitif_NH4</i>				
TcNit	Coeficiente de temperatura para nitrificação	1,07	-	Thomann and Fitzpatrick (1982): 1,045 Harleman <i>et al.</i> (1977): 1,065
KsAmNit	Constante de meia saturação para cons. de amônio	0,5	gN/m^3	Deltares (2014c): 0,5
KsOxNit	Constante de meia saturação para cons. de OD	1	g/m^3	Deltares (2014c): 1
CTNit	Temperatura crítica para nitrificação	3	$^{\circ}\text{C}$	Borchardt, 1966 <i>apud</i> Bowie <i>et al</i> (1985): 4
RcNitOx	Taxa de nitrificação de ordem 0 para OD neg.	0	$\text{gN}/\text{m}^3/\text{d}$	Deltares (2014c): 0
COXNIT	Concentração crítica de oxigênio para nitrificação	1	g/m^3	Hydroscience (1972): 1,5 Stenstrom e Poduska (1980): 0,5 a 4,0
RcNit	Taxa de nitrificação de primeira ordem	0,025	1/d	McCarthy <i>et al.</i> (1984); Berounsky e Nixon (1993): 0 - 0,022 $\mu\text{mol l}^{-1} \text{d}^{-1}$ Thomann e Fitzpatrick (1982): 0,09 - 0,13 Slayton e Trovato (1978, 1979): 0,1 a 0,14
OOXNIT	Concentração ótima de oxigênio para nitrificação	5	gO_2/m^3	Deltares (2014c): 5
<i>Reaeração do oxigênio - RearOXY</i>				
SWRear	Opção para formulação de reaeração de oxigênio	7	-	Deltares (2014c): 7
KLRear	Coeficiente de transferência de reaeração	1,5	m/d	Cerco (1989): 1,5
TCRear	Coeficiente de temperatura para reaeração	1,016	-	Deltares (2014c): 1,016

4.3.5 Condições Iniciais e Condições de Contorno

As condições iniciais para a modelagem da qualidade da água da Baía de Vitória foram impostas para todos os constituintes simulados. Na Tabela 10 são apresentados os valores adotados.

Tabela 10: Condições Iniciais dos constituintes para a modelagem da qualidade da água.

Constituinte	Condição Inicial
NH_4^+	0,39 mg/L
NO_3	0,00 mg/L
DBO	2,50 mgO_2/L
O_2	6,00 mg/L

As condições de contorno do modelo de qualidade da água foram os aportes dos constituintes modelados provenientes dos tributários (rios Santa Maria da Vitória, Bubu, Aribiri e Marinho) e da Baía do Espírito Santo.

Tabela 11: Condições de Contorno para os constituintes na modelagem da qualidade da água.

Contorno	NH_4^+ (mg/L)	NO_3 (mg/L)	DBO ₅ (mgO_2/L)	O_2 (mg/L)
Santa Maria da Vitória	0,01	0,650	3	8,0
Bubu	1,66	0,428	3	6,5
Itanguá	10,51	0,410	36	2,5
Marinho	9,18	0,300	23	1,8
Aribiri	23,89	23,89	35	0,4
Baía do Espírito Santo	0,05	0,010	1	8,0

Na ausência de dados medidos de vazão disponíveis para o rio Itanguá, este não foi considerado como contorno aberto do modelo hidrodinâmico, sendo consideradas apenas suas cargas de massa de constituintes apresentadas na Tabela 11.

As concentrações dos constituintes para o contorno Baía do Espírito Santo foram baseadas nos dados apresentados por Oliveira (2006), extraídos dos relatórios trimestrais do Programa de Monitoramento Ambiental da CVRD realizado no período de 2000 a 2005, através da mediana obtida para o ponto E15 localizado na Baía do Espírito Santo, ponto mais próximo ao contorno do domínio SEIV.

4.3.6 Fontes Pontuais

Foram incluídos os aportes estimados das fontes pontuais urbanas estimados por Moraes (2008) e Cassini (2011) (Tabela 8). Esses valores foram contabilizados como cargas de massa a uma taxa constante para o elemento de grade correspondente à localização da fonte.

Para a correta especificação das concentrações no ponto de lançamento, foi realizado um controle da mistura inicial a partir da relação entre o volume da célula e o passo de tempo adotado na modelagem da qualidade da água.

4.3.7 Vento

Foram impostos no modelo de qualidade da água os mesmos dados de vento local utilizados no modelo hidrodinâmico, disponibilizados em um intervalo de 12 horas, os quais foram interpolados no tempo e considerados uniformes para todo o domínio (detalhamento em 4.2.2.4).

4.3.8 Modelagem de Constituintes de Qualidade da Água

A modelagem dos constituintes de qualidade da água foi realizada considerando os períodos mais próximos de aquisição de dados na Baía de Vitória e em seus tributários (seção 4.3.3). O melhor cenário observado para verificação contempla a 1ª campanha de aquisição de dados na Baía de Vitória, realizada em 13/06/2012, e a 2ª campanha de aquisição de dados nos tributários, realizada nas seguintes datas: 13/06/2012 (rio Santa Maria da Vitória), 09/05/2012 (rio Bubu), 16/05/2012 (rio Itanguá e rio Aribiri) e 17/05/2012 (rio Marinho).

A hidrodinâmica foi simulada para o período de 15/04/2013 a 01/07/2013, contemplando as datas correspondentes aos dados medidos na Baía de Vitória, com margem para os períodos de aquecimento e tempo de residência dos constituintes na baía, considerando que o intervalo de tempo reportado por Saldanha (2007) para que o espalhamento de partículas conservativas se estabilize no interior da Baía de Vitória foi de 15 a 20 dias. Posteriormente, foi realizada a modelagem da qualidade da água para o período de 01/05/2013 a 01/07/2013, excluindo-se assim o período inicial de aquecimento do modelo hidrodinâmico.

Os resultados foram analisados com foco na análise quantitativa da influência dos

processos de qualidade no balanço de oxigênio dissolvido, bem como da influência dos aportes de constituintes de fontes pontuais, dos tributários e da Baía do Espírito Santo para a Baía de Vitória.

4.3.9 Verificação da Modelagem da Qualidade da Água

A verificação foi realizada para os constituintes modelados oxigênio dissolvido, NH_4^+ e NO_3^- através da comparação com os valores medidos na Baía de Vitória, sendo calculado o erro absoluto médio (MAE), equação (18) e o erro percentual absoluto médio (MAPE), equação (33).

$$\text{MAPE} = \left[n^{-1} \sum_{i=1}^n \left(\frac{|P_i - O_i|}{P_i} \right) n^{-1} \right] \quad (33)$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 VERIFICAÇÃO DA MODELAGEM HIDRODINÂMICA

5.1.1 Elevação e Correntes

Na Figura 12 estão apresentadas as séries temporais de elevação e de magnitude das correntes medidas e modeladas.

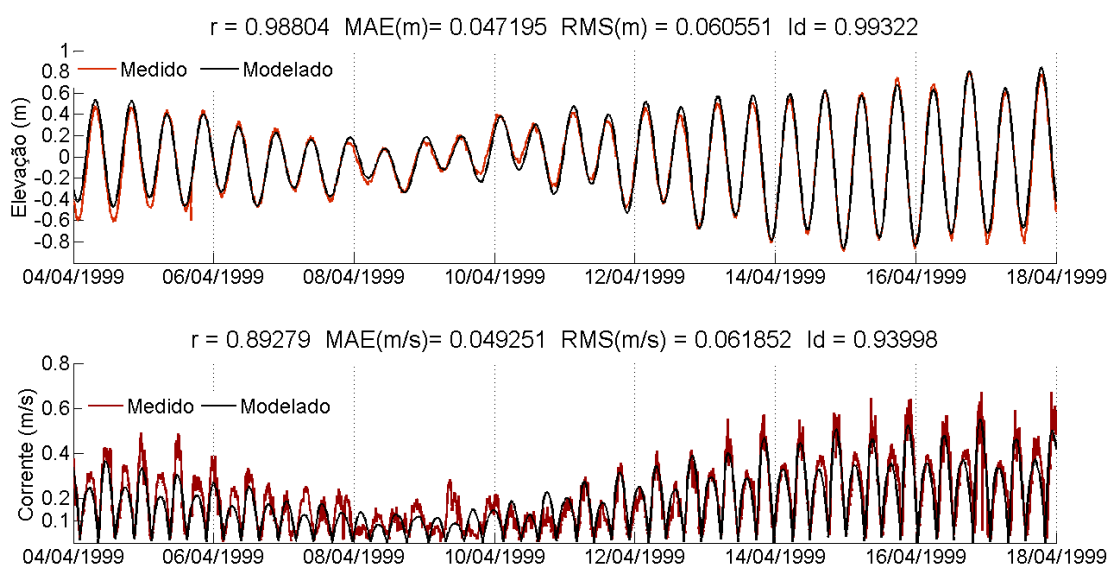


Figura 12: Séries temporais de elevação e de magnitude das correntes medidas (vermelho) e modeladas (preto).

A análise do coeficiente de correlação de Pearson (r) mostra uma correlação positiva muito forte entre os resultados obtidos e os dados observados tanto para elevação (0,99) quanto para a magnitude das correntes (0,89). O erro absoluto médio (MAE) demonstra uma diferença média entre os valores modelados e medidos de 0,047 m para elevação e 0,049 m/s para a magnitude das correntes. O Erro Médio Quadrático (RMS) obtido para a elevação foi de 0,06 m e para magnitude das correntes foi de 0,06 m/s.

Hekstra (2013) apresentou o desempenho do modelo Delft3D-FLOW na representação da elevação e da velocidade em um sistema estuarino através da análise do coeficiente de correlação (r) e RMSE (ou RMS) para duas representações de rugosidade de fundo, obtendo os seguintes valores: 0,9766 para o coeficiente de correlação em ambas representações; 0,2159 e 0,2163 para o RMSE.

Os valores apresentados por Hekstra (2013) demonstram que os resultados do presente estudo estão satisfatórios, com a ocorrência dos parâmetros estatísticos dentro da faixa reportada na literatura ou com desempenho superior.

O índice de concordância de Wilmott (Id) obtido para a elevação foi de 0,99 e para a magnitude das correntes de 0,94. Para as duas variáveis em análise, os valores do Id se encontram na faixa de ocorrência reportada por Nascimento (2013), que realizou verificação da modelagem hidrodinâmica da Baía de Vitória através dos mesmos dados medidos utilizados no presente estudo, testando diferentes tipos de dados de marés para o fornecimento das condições de contorno. O autor apresenta valores de Id entre 0,842 e 0,981 para elevação, e valores entre 0,791 e 0,949 para a magnitude das correntes.

5.1.2 Salinidade e Temperatura

Na Figura 13 e Figura 14 estão apresentados os valores de salinidade e temperatura, respectivamente, medidos em superfície e fundo, média de valores medidos em superfície-fundo e resultados obtidos na modelagem 2DH para cada ponto de amostragem na Baía de Vitória (P1 a P23).

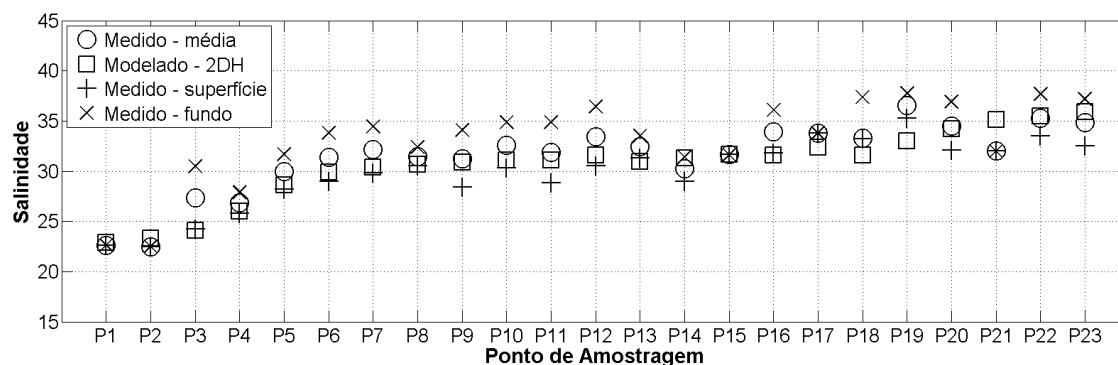


Figura 13: Salinidade medida (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE entre média de superfície-fundo e salinidade modelada 2DH = 1,366. MAPE = 4,35%.

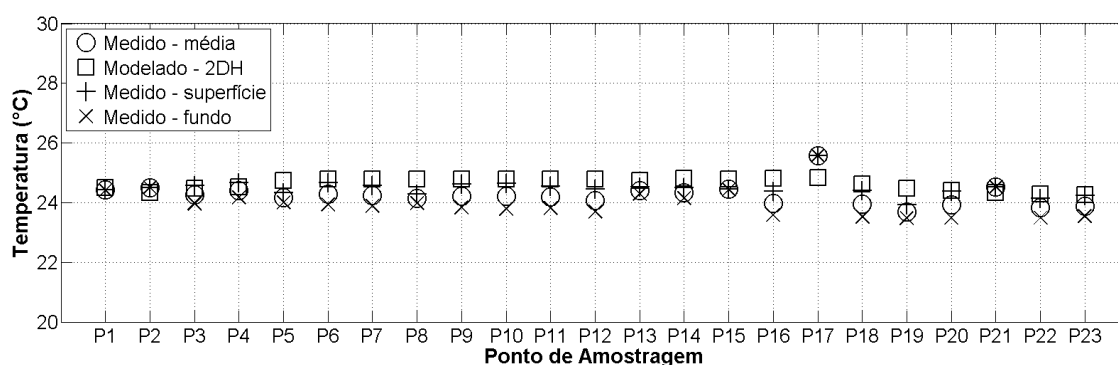


Figura 14: Temperatura medida (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE entre média de superfície-fundo e temperatura modelada 2DH = 0,476° C. MAPE = 1,96%.

Garção e Chacaltana (2009) realizaram o estudo da hidrodinâmica e salinidade na Baía de Vitória através do modelo DIVAST (*Depth Integrated Velocity and Solute Transport*). O erro médio absoluto (MAE) calculado com base nos resultados dos autores para a média da salinidade modelada em 18 estações, considerando os dados observados, foi de 1,858, o que demonstra uma discreta melhora no desempenho do modelo implantado no presente estudo na representação da salinidade, em que foi encontrado um MAE de 1,366. O MAPE para a salinidade foi de 4,35%.

A temperatura também foi bem representada, sendo encontrado um MAE de 0,476°C e MAPE de 1,96% em relação aos valores observados.

5.2 VERIFICAÇÃO DA MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA

A verificação dos resultados da modelagem da qualidade da água foi realizada para os constituintes disponíveis na base de dados amostrados na Baía de Vitória (seção

4.3.3.1), sendo eles: oxigênio dissolvido, nitrogênio amoniacal e nitrato.

5.2.1 Oxigênio Dissolvido

Na Figura 15 estão apresentados os valores oxigênio dissolvido (OD) medidos em superfície e fundo, a média de valores medidos em superfície-fundo e resultados obtidos na modelagem 2DH para cada ponto de amostragem na Baía de Vitória (P1 a P23).

Na Tabela 12 são apresentados os valores de concentração de OD observado (média de superfície-fundo) e modelado (2DH) para cada ponto na Baía de Vitória (P1 a P23), o erro absoluto médio (MAE) e o erro percentual absoluto médio (MAPE) entre os valores observados e modelados.

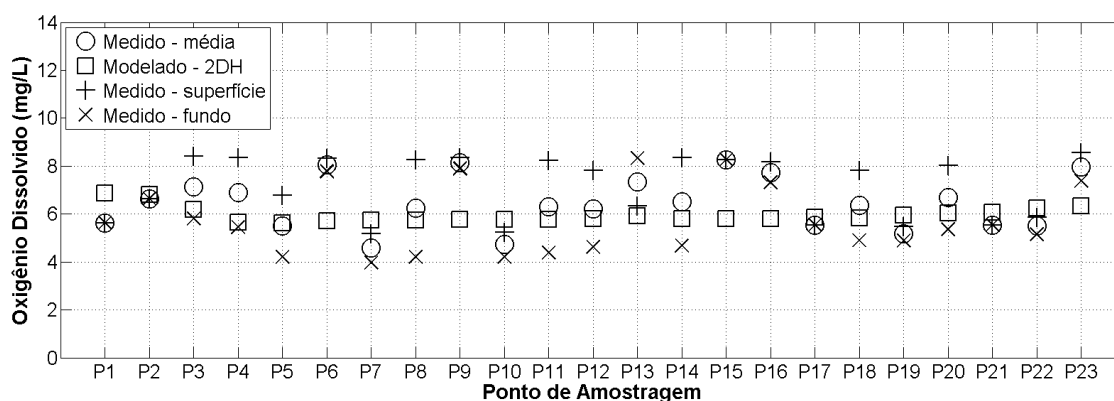


Figura 15: Oxigênio dissolvido medido (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelado para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE para média de superfície-fundo e oxigênio dissolvido modelado 2DH = 1,03 mg O₂/L; MAPE = 15,9%.

Tabela 12: Concentração de oxigênio dissolvido observada (média de superfície-fundo) e concentração de oxigênio dissolvido modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23; erro absoluto médio (MAE) e erro percentual absoluto médio (MAPE) entre valor observado e modelado.

Ponto	[O ₂] Observada (mg O ₂ /L)	[O ₂] Modelada (mg O ₂ /L)	Erro Absoluto (mg O ₂ /L)
P1	5,63	6,86	1,23
P2	6,64	6,81	0,17
P3	7,12	6,18	0,94
P4	6,9	5,65	1,25
P5	5,51	5,63	0,12
P6	8,05	5,7	2,35
P7	4,58	5,73	1,15
P8	6,23	5,75	0,48
P9	8,13	5,76	2,37
P10	4,74	5,77	1,03
P11	6,31	5,77	0,54
P12	6,22	5,8	0,42
P13	7,33	5,93	1,4
P14	6,51	5,79	0,72
P15	8,27	5,81	2,46
P16	7,74	5,8	1,94
P17	5,54	5,87	0,33
P18	6,37	5,82	0,55
P19	5,18	5,94	0,76
P20	6,69	6,05	0,64
P21	5,53	6,07	0,54
P22	5,51	6,24	0,73
P23	7,97	6,33	1,64
Erro Absoluto Médio (MAE)			1,03 mg/L
Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE)			15,97%

O MAE e o MAPE foram, respectivamente, 1,03 mg/L e 15,9%. Os pontos que apresentaram maior desvio absoluto foram P6, P9, P15, P16 e P23, acima de 1,5 mg/L, sendo o OD subestimado nesses locais. A tendência a subestimação do OD foi observada também na maior parte dos pontos de observação.

Em análise semelhante do erro médio entre o OD medido e OD modelado para o Lago El-Burullus (Delta do Nilo, Egito) também com o modelo Delft3D, El-Adawy *et al.* (2014) encontraram o erro médio de 0,87 mg/L, para concentrações de OD observada que variaram até cerca de 7 mg/L, o que representa um erro percentual de aproximadamente 12%, sendo estes valores próximos aos encontrados no presente estudo; assim, a representação qualitativa e quantitativa do OD na Baía de Vitória foi considerada satisfatória.

5.2.2 Nitrogênio Amoniacal

Na Figura 16 estão apresentados os valores nitrogênio amoniacal medido em superfície e fundo, a média de valores medidos em superfície-fundo e resultados obtidos na modelagem 2DH para cada ponto de amostragem na Baía de Vitória (N-NH_4^+) (P1 a P23).

Na Tabela 13 são apresentados os valores de concentração de nitrogênio amoniacal observado (média de superfície-fundo) e modelado (2DH) para cada ponto na Baía de Vitória (P1 a P23), o erro absoluto médio (MAE) e o erro percentual absoluto médio (MAPE) entre os valores observados e modelados.

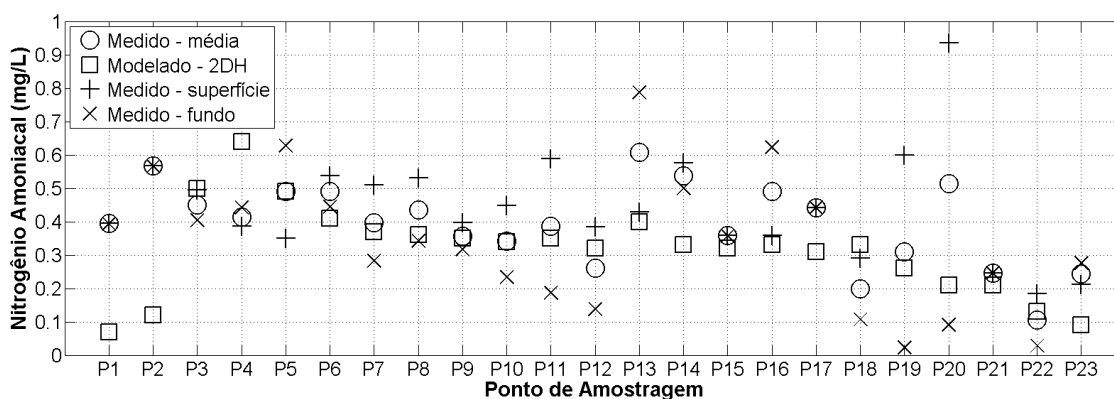


Figura 16: Nitrogênio amoniacal medido (superfície, fundo e média de superfície-fundo) e modelado para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23. MAE para média de superfície-fundo e nitrogênio amoniacal modelado 2DH = 0,120 mg N/L; MAPE = 30,7%.

Tabela 13: Concentração de nitrogênio amoniacal observada (média de superfície-fundo) e concentração de nitrogênio amoniacal modelada para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23; erro absoluto médio (MAE) e erro percentual absoluto médio (MAPE) entre valor observado e modelado.

Ponto	[NH ₄] Observada (mg N/L)	[NH ₄] Modelada (mg N/L)	Erro Absoluto (mg N/L)
P1	0,39	0,07	0,32
P2	0,57	0,12	0,45
P3	0,45	0,50	0,05
P4	0,41	0,64	0,23
P5	0,49	0,49	0,00
P6	0,49	0,41	0,08
P7	0,40	0,37	0,03
P8	0,44	0,36	0,08
P9	0,36	0,35	0,01
P10	0,34	0,34	0,00
P11	0,39	0,35	0,04
P12	0,26	0,32	0,06
P13	0,61	0,40	0,21
P14	0,54	0,33	0,21
P15	0,36	0,32	0,04
P16	0,49	0,33	0,16
P17	0,44	0,31	0,13
P18	0,20	0,33	0,13
P19	0,31	0,26	0,05
P20	0,51	0,21	0,30
P21	0,25	0,21	0,04
P22	0,11	0,13	0,02
P23	0,24	0,09	0,15
Erro Absoluto Médio (MAE)			0,12 mg/L
Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE)			30,75%

O MAE e o MAPE foram, respectivamente, 0,12 mg N/L e 30,75%. Os pontos que apresentaram maior desvio absoluto foram P1, P2, P4, P13, P14 e P20, acima de 0,2 mg N/L, sendo o nitrogênio amoniacal subestimado nesses locais, com exceção do ponto P4, onde foi superestimado. A tendência à subestimação foi observada também na maior parte dos pontos de observação.

El-Adawy *et al.* (2014) encontraram um erro médio de 0,22 mg N/L entre NH₄ medido e modelado, para concentrações observadas que variaram até cerca de 1,2 mg N/L, representado um erro percentual de aproximadamente 18,33%. O MAE encontrado no presente estudo de 0,12 mg N/L, apesar de menor, está associado a um erro percentual um pouco maior, com um MAPE de 30%.

Os resultados do modelo foram satisfatórios com relação à representação quantitativa e

qualitativa do constituinte na Baía de Vitória, ainda que tenham sido considerados aportes estimados com base em dados populacionais para as fontes pontuais (MORAIS, 2008; CASSINI, 2011), não existindo disponível medição direta desse parâmetro *in situ* para cada fonte pontual ao longo da baía.

5.2.3 Nitrato

Na Figura 17 estão apresentadas as concentrações de nitrato (NO_3) obtidas na modelagem 2DH e o limite de detecção deste constituinte pelo método de analítico para as amostras da Baía de Vitória nos pontos P1 a P23, sendo este valor igual a 0,3 mg N/L.

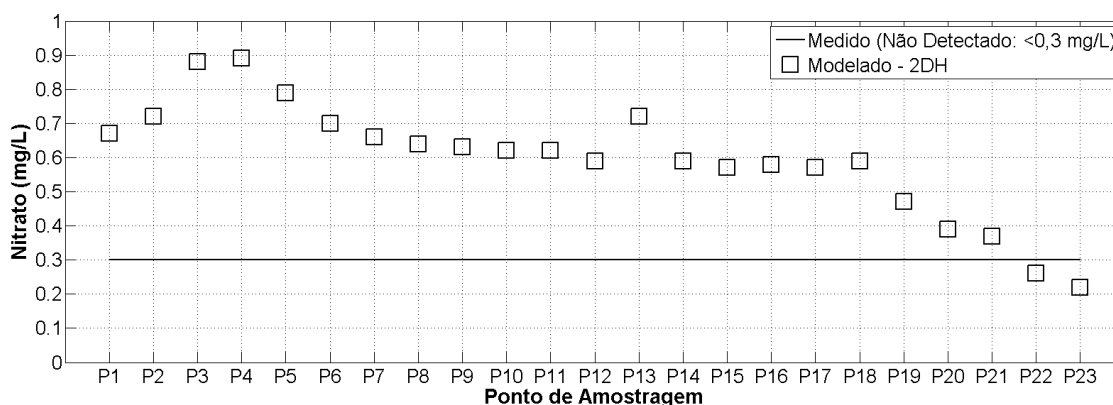


Figura 17: NO_3 medido (não detectado em superfície e fundo, <0,3 mg N/L) e modelado para os pontos de amostragem na Baía de Vitória P1 a P23.

Nas análises laboratoriais, este constituinte não foi detectado em nenhum ponto de observação, tanto em superfície quanto em fundo. Os pontos que apresentaram concentração modelada abaixo de 0,3 mg N/L foram P22 e P23. O restante tiveram concentrações acima de 0,3 mg N/L, sendo os maiores valores identificados nos pontos P3 (0,88 mg N/L) e P4 (0,89 mg N/L).

O nitrato foi a única variável que resultou em valores simulados um pouco acima da faixa de valores observados tanto na base de dados quanto na literatura. Cassini (2011) reporta erro similar nas simulações realizadas com o mesmo constituinte baseado nos aportes pluviais provenientes do monitoramento do IEMA, também utilizados no presente estudo. A faixa de valores para trabalhos de amostragem na Baía de Vitória é de 0,02 – 0,55 mg N/L (STERZA, 2002 *apud* CASSINI, 2011), <0,1 mg N/L (HABITEC, 1997 *apud* CASSINI, 2011) e 0,01 – 0,15 mg N/L (CEPEMAR, 2009).

apud CASSINI, 2011). Os resultados de modelagem obtidos por Cassini (2011) para NO_3^- variaram entre 0,34 – 0,80 mg N/L, faixa de valores similar à encontrada neste estudo com superestimação do NO_3^- .

A superestimação também pode estar associada a não consideração do processo de crescimento e mortalidade de algas na modelagem numérica. O crescimento algal envolve a captação de nutrientes inorgânicos, incluindo compostos de nitrogênio como NH_4^+ e NO_3^- , com um consumo preferencial de NH_4^+ (DELTARES, 2014d). Esse processo poderia, portanto, diminuir a concentração de NO_3^- na coluna d'água. Por outro lado, a mortalidade das algas volta a adicionar detritos de nitrogênio ao sistema (DELTARES, 2014d).

5.3 MODELAGEM DOS PROCESSOS DE QUALIDADE DA ÁGUA

A seguir são apresentadas as concentrações de OD, DBO5, nitrogênio amoniacal (NH_4^+ e NH_3) e NO_3^- em função dos processos físico-químicos e biológicos para três regiões da Baía de Vitória através da seleção de três pontos de amostragem que demonstraram melhor aproximação entre os valores observados e os resultados da modelagem da qualidade da água para o balanço de oxigênio dissolvido, sendo eles: P2 (região superior do estuário); P5 (região média do estuário) e P17 (região inferior do estuário). É apresentada também a quantidade de massa dos constituintes analisados removida ou adicionada pelos processos considerados (reaeração, mineralização e nitrificação).

5.3.1 Oxigênio Dissolvido

Na Figura 18, Figura 19 e Figura 20 são apresentadas as concentrações de OD ao longo do período de simulação para pontos das regiões superior, média e inferior do estuário, respectivamente, em quatro cenários considerando: 1) reaeração, mineralização e nitrificação; 2) mineralização e nitrificação; 3) reaeração e nitrificação; e 4) mineralização e reaeração.

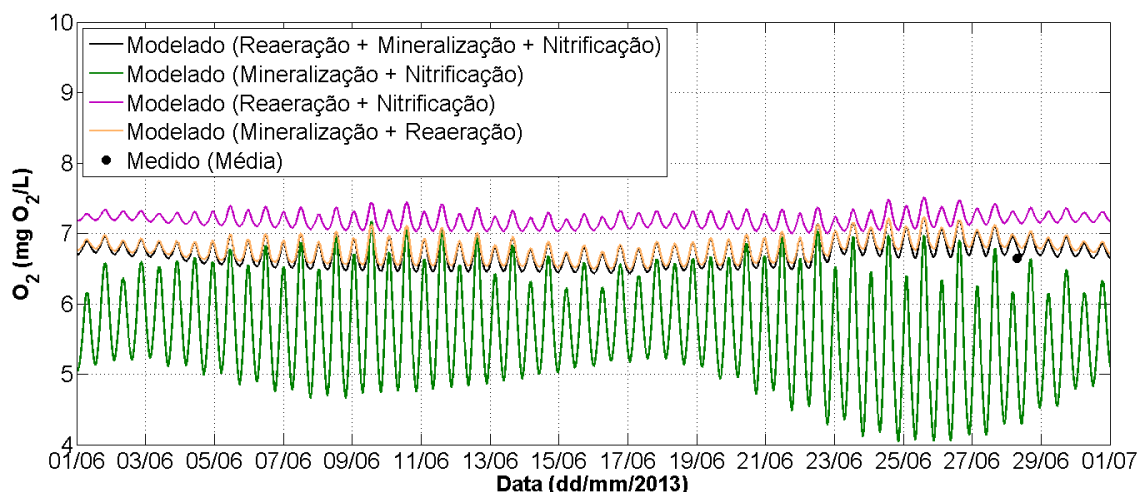


Figura 18: Séries temporais de concentração de OD (mg O₂/L) modelado na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); mineralização + nitrificação (verde); reaeração + nitrificação (rosa); mineralização + reaeração (amarelo). O ponto representa o valor da concentração de OD medido (média superfície-fundo).

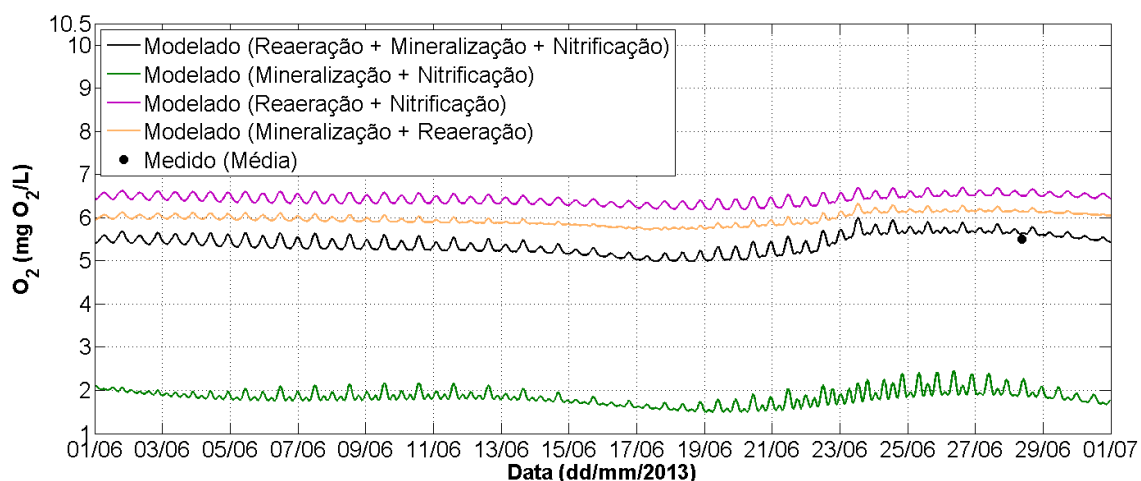


Figura 19: Séries temporais de concentração de OD (mg O₂/L) modelado na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); mineralização + nitrificação (verde); reaeração + nitrificação (rosa); mineralização + reaeração (amarelo). O ponto representa o valor da concentração de OD medido (média superfície-fundo).

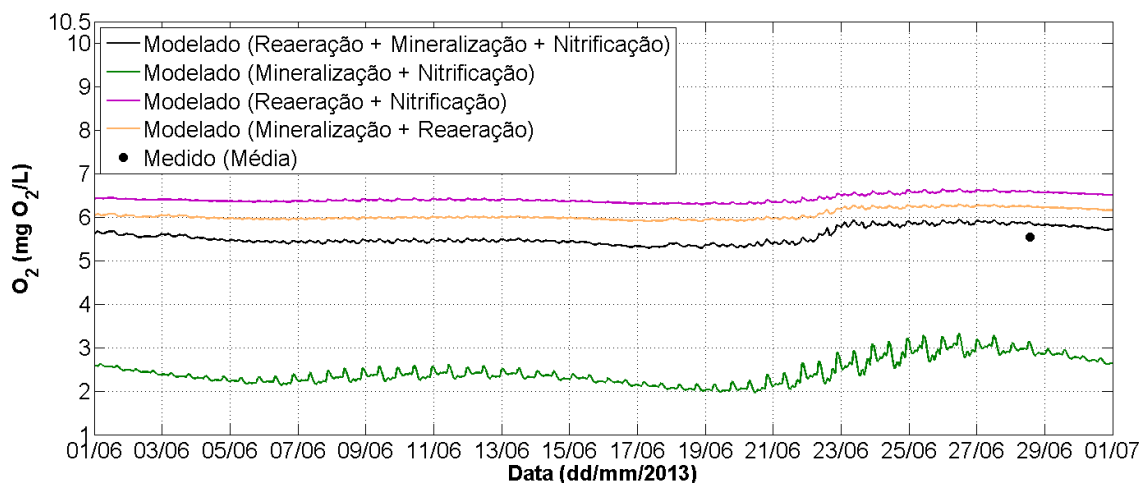


Figura 20: Séries temporais de concentração de OD ($\text{mg O}_2/\text{L}$) modelado na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); mineralização + nitrificação (verde); reaeração + nitrificação (rosa); mineralização + reaeração (amarelo). O ponto representa o valor da concentração de OD medido (média superfície-fundo).

Entre os processos analisados, a reaeração pode ser considerada um importante processo de introdução de OD na Baía de Vitória, sendo 17%, 53% e 46% do OD nas regiões superior, média e inferior do estuário, respectivamente, adicionado pela reaeração.

A mineralização, associada ao decaimento da DBO5, foi o principal processo de perda de OD, chegando a -19% na região média do estuário. Isso pode ser atribuído à elevada carga de DBO5 adicionada principalmente pelo rio Itanguá nessa região.

Entre os pontos analisados, o valor máximo de redução de OD devido à nitrificação foi observado na região média do estuário, de -11%, sendo esse processo menos significativo na região superior estuarina, em que foi observada a resultante de -1% no balanço de OD. Os rios Santa Maria da Vitória e Bubu, que exercem maior influência na região superior estuarina, possuem menor concentração de nitrogênio amoniacal em relação às demais fontes presentes na Baía de Vitória, portanto, a nitrificação possui menor efeito no decaimento do OD nessa região.

5.3.2 Demanda Bioquímica de Oxigênio

Na Figura 21, Figura 22 e Figura 23 são apresentadas as concentrações de DBO5 ao longo do período de simulação para pontos das regiões superior, média e inferior do estuário, respectivamente, em dois cenários, sendo um com o processo de mineralização ativado (reaeração + mineralização + nitrificação) e outro com a mineralização

desativada (reaeração + nitrificação) para a observação do impacto do processo na concentração da DBO5.

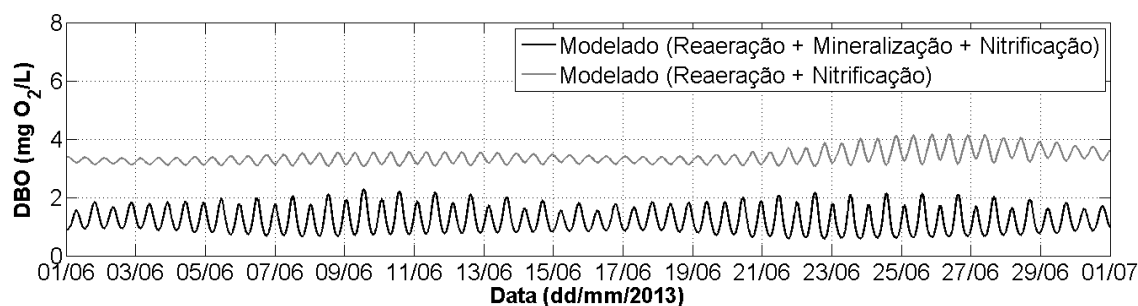


Figura 21: Séries temporais de concentração de DBO5 (mg O₂/L) modelada na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + nitrificação (cinza).

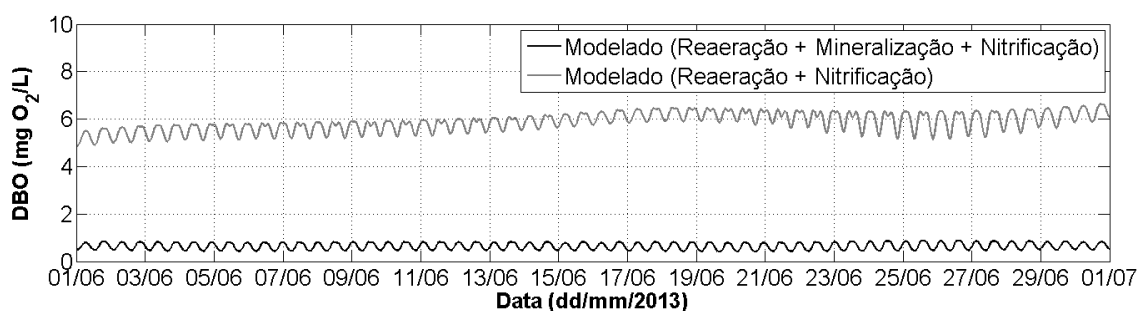


Figura 22: Séries temporais de concentração de DBO5 (mg O₂/L) modelada na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + nitrificação (cinza).

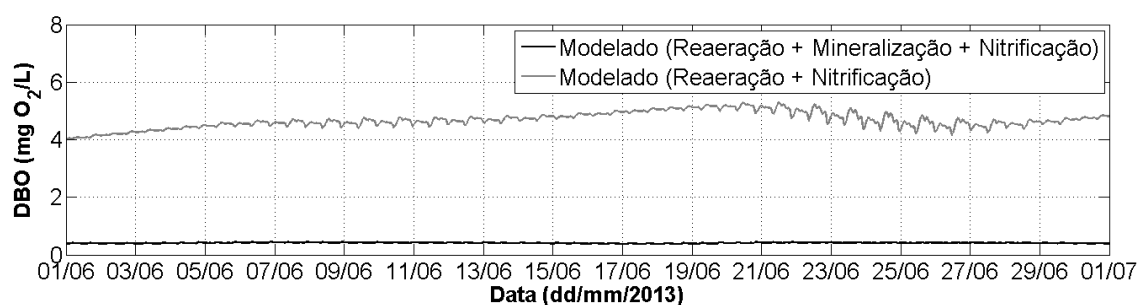


Figura 23: Séries temporais de concentração de DBO5 (mg O₂/L) modelada na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + nitrificação (cinza).

É observado um significativo decaimento da DBO5 na Baía de Vitória pelo processo de mineralização, variando entre -176% na região estuarina superior, -814% na região

média e -1038% na região inferior.

5.3.3 Nitrogênio Amoniacal

O nitrogênio amoniacal total compreende o íon amônio (NH_4^+) e a amônia livre ou não ionizada (NH_3). O equilíbrio entre essas duas formas ocorre em função das condições de pH, temperatura e salinidade. Nesta seção são apresentados resultados apenas para o NH_4^+ , visto que para o processo de conversão $\text{NH}_4^+ \rightarrow \text{NH}_3$ adotado pelo modelo numérico, o impacto percentual do processo de nitrificação será o mesmo para a concentração de ambos, NH_4^+ e NH_3 .

Na Figura 24, Figura 25 e Figura 26 são apresentadas as concentrações de NH_4^+ ao longo do período de simulação para pontos das regiões superior, média e inferior do estuário, respectivamente, em dois cenários: com o processo de nitrificação ativado (reaeração + mineralização + nitrificação), com o processo de nitrificação desativado (reaeração + mineralização).

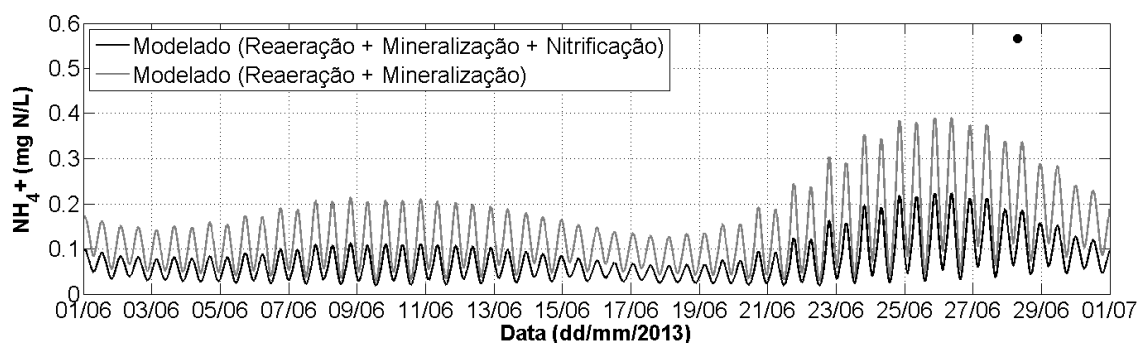


Figura 24: Séries temporais de concentração de NH_4^+ (mg N/L) modelado na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).

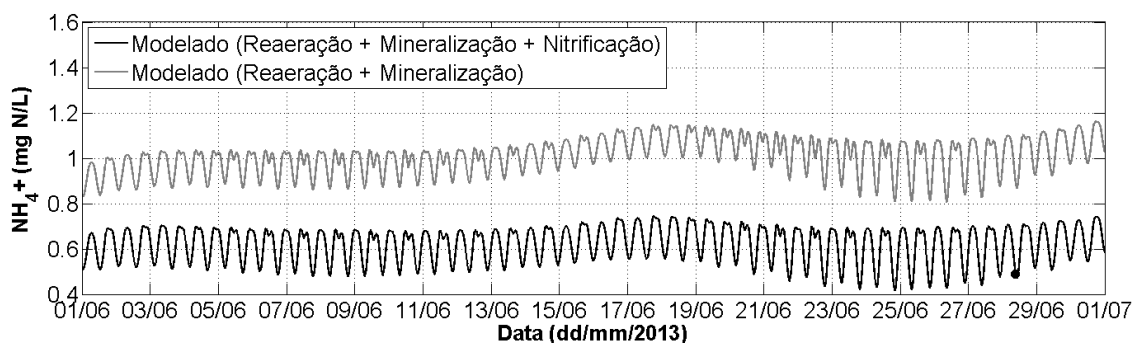


Figura 25: Séries temporais de concentração de NH_4^+ (mg N/L) modelado na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).

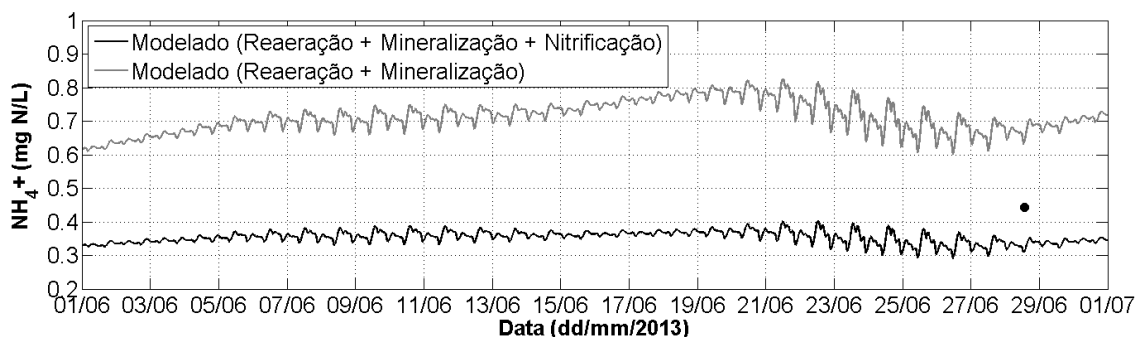


Figura 26: Séries temporais de concentração de NH_4^+ (mg N/L) modelado na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).

Entre os pontos em análise, a nitrificação é responsável pela remoção de até 101% do nitrogênio amoniacal N-NH_4^+ do sistema, sendo este valor encontrado na região inferior estuarina. Na região superior a redução foi -86% e na região média de -63%.

5.3.4 Nitrato

Na Figura 27, Figura 28 e Figura 29 são apresentadas as concentrações de nitrato (NO_3^-) ao longo do período de simulação para pontos das regiões superior, média e inferior do estuário, respectivamente, em dois cenários, sendo que no primeiro o processo de nitrificação foi ativado (reaeração + mineralização + nitrificação) e no segundo o processo de nitrificação foi desativado (reaeração + mineralização).

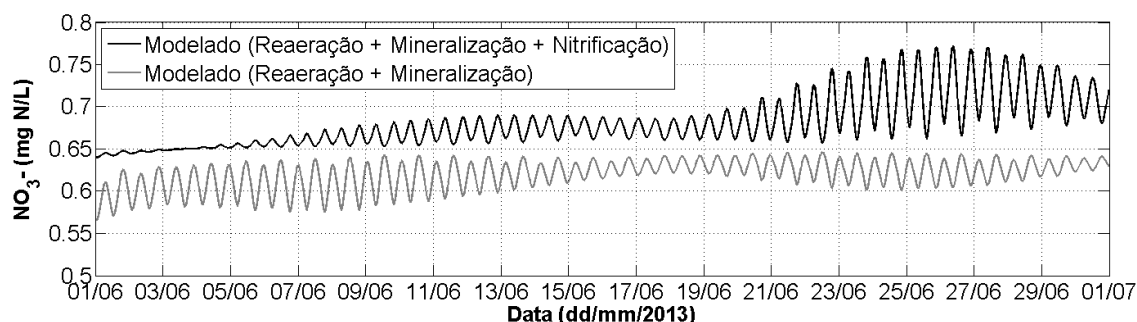


Figura 27: Séries temporais de concentração de NO_3^- (mg N/L) modelado na região superior da Baía de Vitória (P2) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).

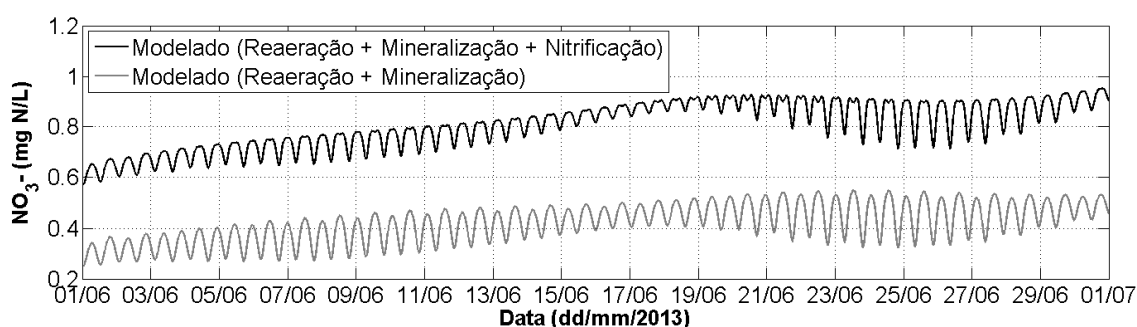


Figura 28: Séries temporais de concentração de NO_3^- (mg N/L) modelado na região média da Baía de Vitória (P5) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).

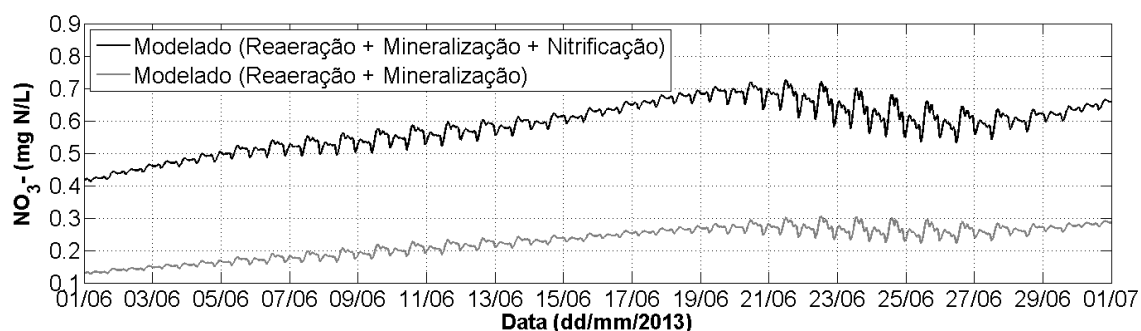


Figura 29: Séries temporais de concentração de NO_3^- (mg N/L) modelado na região inferior da Baía de Vitória (P17) para junho/2013 com a consideração dos processos: reaeração + mineralização + nitrificação (preto); reaeração + mineralização (cinza).

Os valores de NO_3^- adicionados pela nitrificação nos pontos avaliados na região superior, média e inferior são, respectivamente, +9%, +48%, +61%.

Na análise da simulação do ponto P2, localizado na região superior da Baía de Vitória, verifica-se que mesmo com processo de nitrificação desativado, os valores de

concentração de NO_3^- estão acima da faixa de valores observados na literatura (STERZA, 2002; HABITEC, 1997; CEPEMAR, 2009 *apud* CASSINI, 2011), o que pode indicar uma superestimação da concentração deste constituinte nos contornos, visto que o aumento de NO_3^- devido ao processo de nitrificação não foi determinante para que os valores ficassem acima da faixa de ocorrência ($[\text{NO}_3^-]$ mínima observada = 0,02 mg N/L; $[\text{NO}_3^-]$ máxima observada = 0,55 mg N/L). Neste local, as fontes próximas de NO_3^- são apenas o rio Santa Maria da Vitória e o rio Bubu, sendo seus valores de concentração de NO_3^- provenientes do Monitoramento Qualitativo das Bacias Hidrográficas do rio Santa Maria da Vitória e do rio Jucu (Tabela 11). Outra hipótese para explicar a superestimação é a não consideração do processo de crescimento algal na modelagem numérica, que promove o consumo de NO_3^- , como discutido na seção 5.2.3.

5.3.5 Síntese do Efeito dos Processos de Qualidade da Água nos Constituintes

Na Tabela 14 é apresentada uma síntese do efeito dos processos de qualidade da água considerados na modelagem sobre os constituintes em análise.

Tabela 14: Análises de sensibilidade da concentração dos constituintes para os processos considerados.

Região Estuarina	Constituinte	Efeito % do processo na concentração		
		Reaeração	Nitrificação	Mineralização
Superior	OD	+17	-1	-8
	DBO	*	*	-176
	NH_4^+	*	-86	*
	NO_3^-	*	+9	*
Média	OD	+53	-11	-19
	DBO	*	*	-814
	NH_4^+	*	-63	*
	NO_3^-	*	+48	*
Inferior	OD	+46	-9	-16
	DBO	*	*	-1038
	NH_4^+	*	-101	*
	NO_3^-	*	+61	*

*Efeito indireto (não calculado).

5.4 EFEITO DAS FONTES PONTUAIS NO OXIGÊNIO DISSOLVIDO

Para a avaliação do efeito das fontes pontuais representadas na área de estudo sobre a

concentração de OD, foram analisados dois cenários de simulação: (i) modelagem com fontes pontuais; (ii) modelagem sem fontes pontuais.

Na Figura 30 é apresentada a concentração de OD ao longo do período de simulação, junho/2013, para quatro pontos de monitoramento, sendo selecionados os pontos mais próximos às seguintes descargas pontuais: galerias da região interna da Baía de Vitória (P3); galeria da rua Duarte Ferreira (P8); galeria da Av. Paulino Muller (P14); e galeria da EBAP da CESAN (P15). Na Tabela 15 é mostrado o percentual de redução de OD devido aos lançamentos das fontes pontuais, calculado através da diferença entre as séries simuladas com fontes e sem fontes.

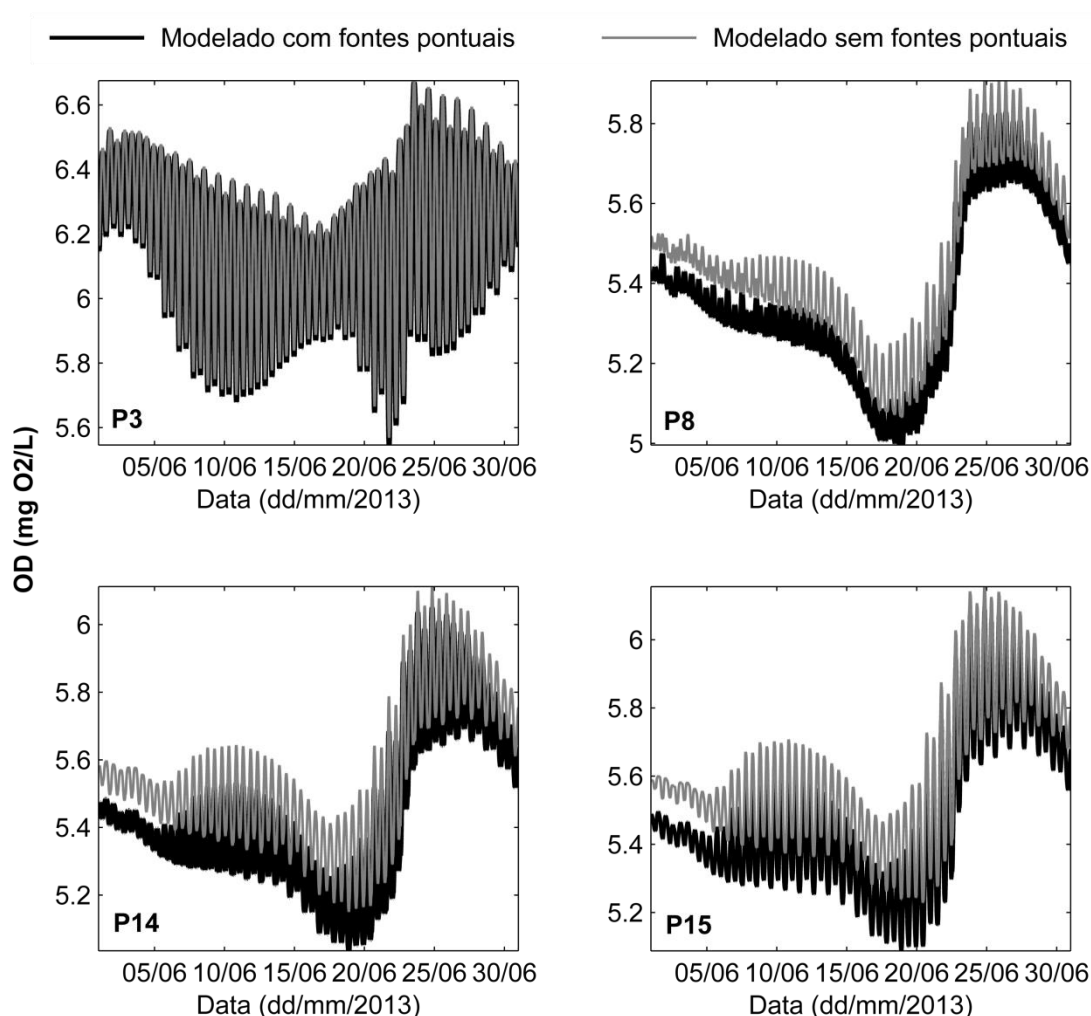


Figura 30: Concentração de OD (mg O₂/L) modelada com e sem fontes pontuais para os pontos de observação próximos aos lançamentos.

Tabela 15: Percentual local de redução de oxigênio dissolvido devido às fontes pontuais da Baía de Vitória.

Fonte Pontual	Ponto de observação próximo	% de redução da [OD]
Galerias da região interna da Baía de Vitória	P3	-0,2
Galeria da rua Duarte Ferreira	P8	-1,6
Galeria da Av. Paulino Muller	P14	-2,0
Galeria EBAP da CESAN	P15	-2,1

É possível notar que a redução de OD devido às fontes pontuais consideradas, mesmo nos pontos mais próximos selecionados, é pouco significativa, o que indica que a concentração de OD na Baía de Vitória pode ser influenciada principalmente pelos aportes de nutrientes e DBO provenientes de seus tributários: rios e canais afluentes à baía que adicionam significativas concentrações desses constituintes (Tabela 8 e Tabela 11).

5.5 DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DOS CONSTITUINTES NA BAÍA DE VITÓRIA

Nesta seção são apresentados os mapas de distribuição da concentração dos constituintes modelados no domínio SEIV, que inclui a Baía de Vitória e seus tributários, e a Baía do Espírito Santo.

Para a distribuição de cada constituinte, são mostrados quatro momentos: (a) máxima velocidade da corrente de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade da corrente de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade da corrente de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade da corrente de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013). Esses momentos de maior velocidade da corrente na maré de sizígia, na qual ocorrem as maiores amplitudes de maré, representam condições de maior dispersão das plumas provenientes dos tributários, canais e galerias presentes ao longo da Baía de Vitória e maior diluição dos constituintes na baía.

São apresentados também os momentos críticos para a diluição dos constituintes na Baía de Vitória, sendo selecionados os momentos em que ocorreram sinais de maior concentração destes. Todos os instantes observados estiveram associados a condições de maré de quadratura, em que ocorrem as menores amplitudes de maré, e predominantemente a momentos de estufa de vazante, configurando um cenário de menor entrada de água da Baía do Espírito Santo para a Baía de Vitória, indicando que,

nesses períodos, devido a menor renovação das águas em seu interior, contínuo aporte de contaminantes provenientes das fontes dispostas no interior da Baía de Vitória e menor dispersão das plumas, ocorre maior deterioração da qualidade das suas águas na regiões próximas às fontes, associada também às menores velocidades que provocam menor dispersão das plumas e menor diluição.

5.5.1 Oxigênio Dissolvido

Na Figura 31 é apresentada a concentração de OD para os quatro momentos de menor velocidade das correntes durante a enchente e vazante para a maré de quadratura e de sizígia.

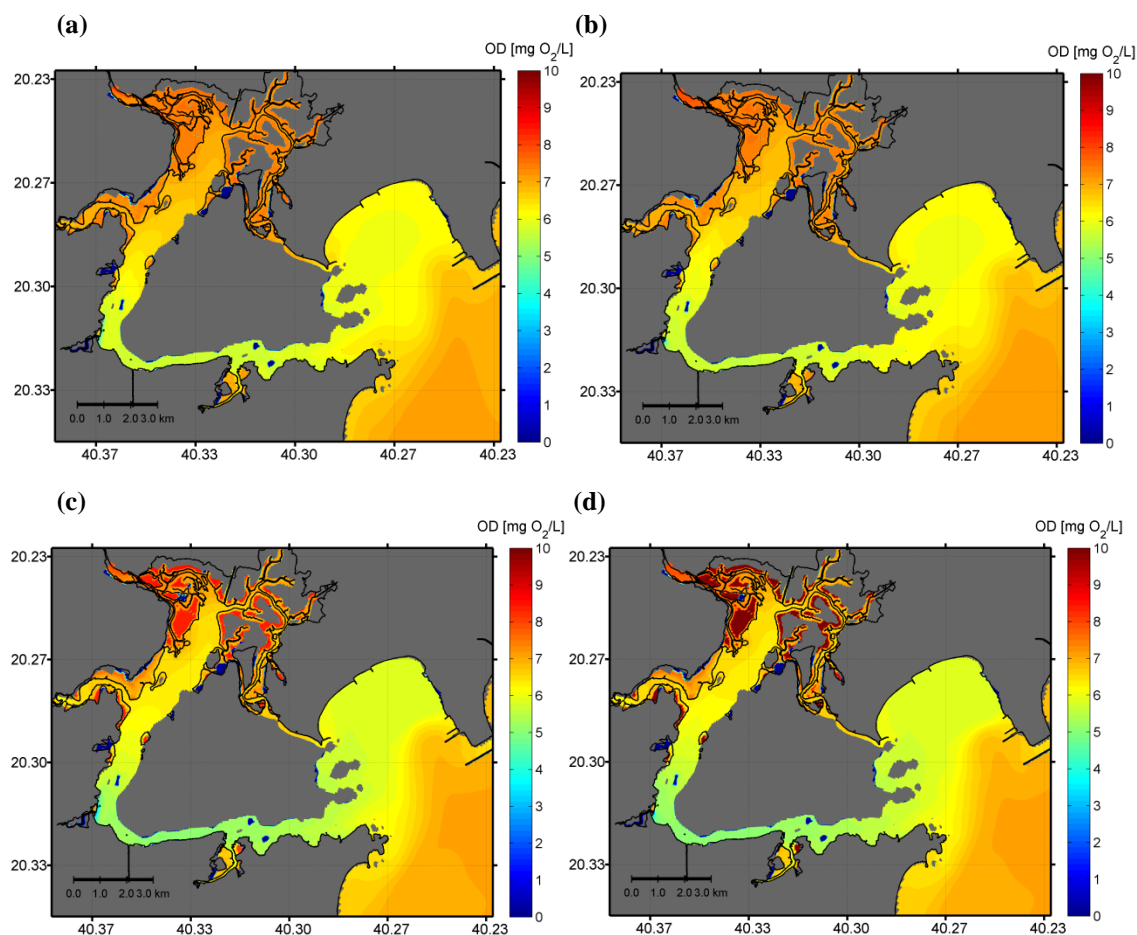


Figura 31: Concentração de OD (mg O₂/L) modelada em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).

Nesses instantes de maior dispersão da pluma dos tributários, canais e fontes pontuais, pode ser observado que, durante a sizígia, período em que ocorrem as maiores

amplitudes de maré, a concentração de OD na Baía de Vitória é maior em relação à quadratura, período em que ocorrem as menores amplitudes de maré. Isso possivelmente está associado à maior entrada de água proveniente da Baía do Espírito Santo, com elevado OD e menor aporte de poluentes que provoquem seu decaimento.

Apesar das maiores concentrações de OD na baía durante a sizígia, em algumas zonas de baixa profundidade, são notados maiores valores de concentração de OD em todos os instantes selecionados, sendo os maiores valores de concentração verificados durante a quadratura nestas zonas, principalmente na área de manguezal próximo à desembocadura do rio Santa Maria. Devido ao menor tamanho da coluna d'água, o processo de reaeração, um dos principais processos de adição de oxigênio na Baía de Vitória, promove um significativo aumento local de OD nessas zonas, levando-o à concentração de saturação. Como a profundidade limite para secamento das células no modelo foi definida como 0,001m, os processos continuam atuando mesmo em ínfimas profundidades, o que pode gerar também ruídos em alguns locais. Na Figura 32, a seguir, pode ser observada a distribuição do percentual de saturação de O_2 e da constante da taxa de reaeração ($R_{c_{rear}}$) referente ao momento (d) apresentado na Figura 31, em que nas áreas com maiores concentrações de OD é atingida a concentração de saturação e encontram-se as maiores taxas de reaeração. Como $R_{c_{rear}}$ é inversamente proporcional à profundidade, conforme a equação (27), nas regiões de profundidades muito pequenas, ocorre um grande aumento da constante, aumentando também o fluxo de reaeração que é diretamente proporcional à $R_{c_{rear}}$.

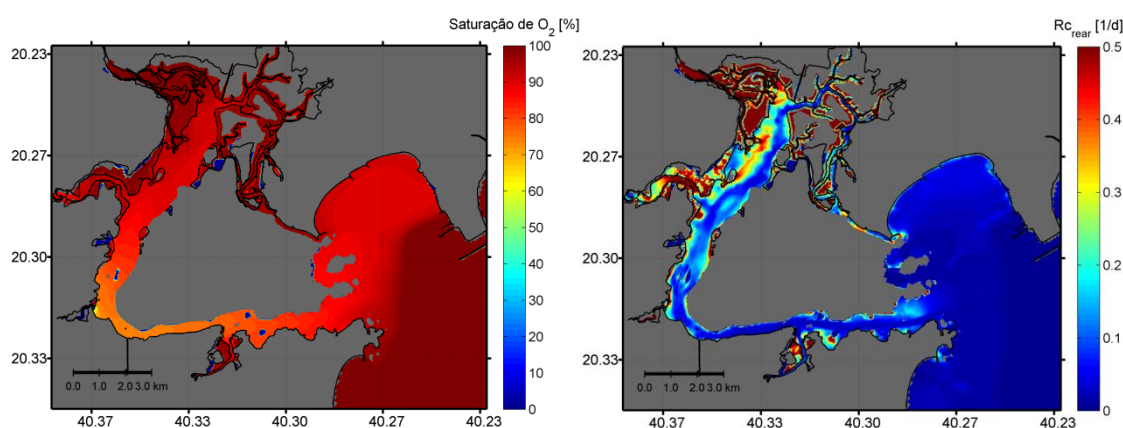


Figura 32: Saturação de O_2 (%) e constante da taxa de reaeração $R_{c_{rear}}$ (1/d) no instante de máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).

Na Figura 33 é mostrado o momento crítico para a concentração de OD na Baía de

Vitória no período de simulação, observado durante a estofa da vazante da maré de quadratura (16:00h UTC – 17/06/2013).

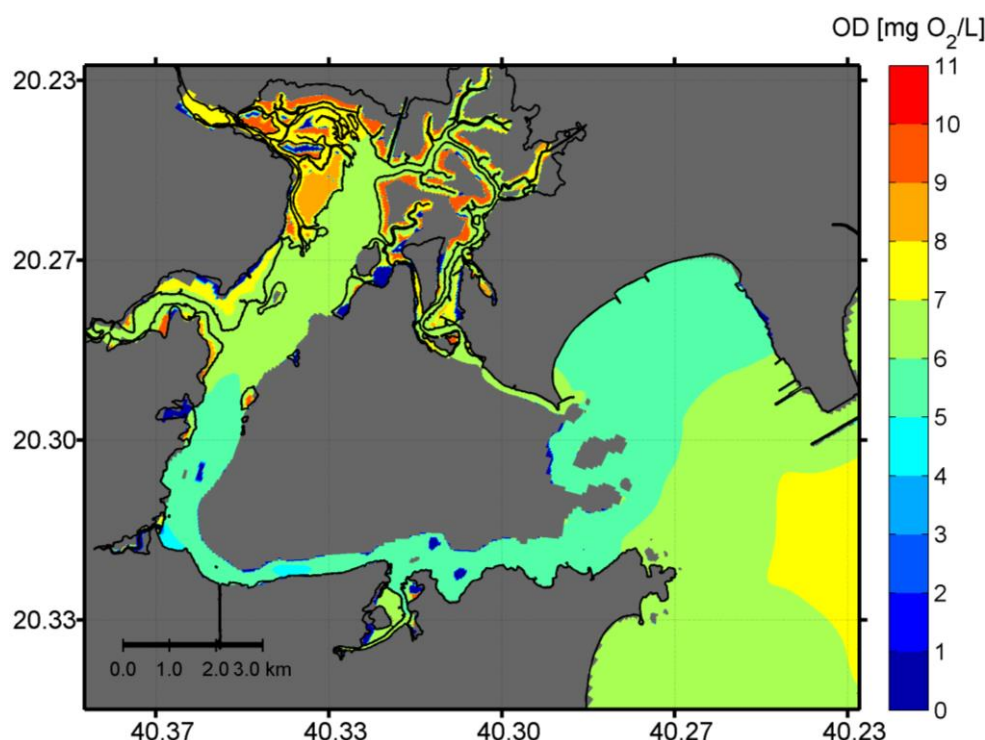


Figura 33: Momento crítico para a concentração de OD ($\text{mg O}_2/\text{L}$) modelado ocorrente na estofa da vazante da maré de quadratura (16:00h UTC – 17/06/2013).

O menor aporte de OD proveniente da Baía do Espírito Santo, devido ao menor volume de água que entra na maré de quadratura, faz com que os níveis de oxigênio no interior da Baía de Vitória sejam menores nesses períodos. Apesar do menor tamanho da coluna d'água favorecer o processo de reaeração, a diminuição da velocidade das correntes atua de forma contrária e é possível que a reaeração isoladamente não seja suficiente para compensar o déficit de OD devido ao menor aporte da Baía do Espírito e contínuo aporte de contaminantes proveniente dos tributários, canais e galerias dispostos no interior da Baía de Vitória.

É observada uma maior deterioração da qualidade da água na região média da Baía de Vitória, principalmente próximo ao rio Itanguá, em que os níveis mínimos de OD ficam em torno de $4 \text{ mg O}_2/\text{L}$.

A Resolução 357/2005 do Conselho Nacional de Meio Ambiente (CONAMA), que dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, entre outras providências, estabelece que a concentração mínima de OD para Águas Salobras é de $5 \text{ mg O}_2/\text{L}$. Assim, apenas na região da desembocadura do rio

Itanguá foram observados valores de concentração de OD abaixo do mínimo estabelecido ao longo do período de simulação.

5.5.2 Demanda Bioquímica de Oxigênio

Na Figura 34 é apresentada a concentração de DBO5 para os quatro instantes de menor velocidade das correntes durante a enchente e vazante para a maré de quadratura e de sizígia.

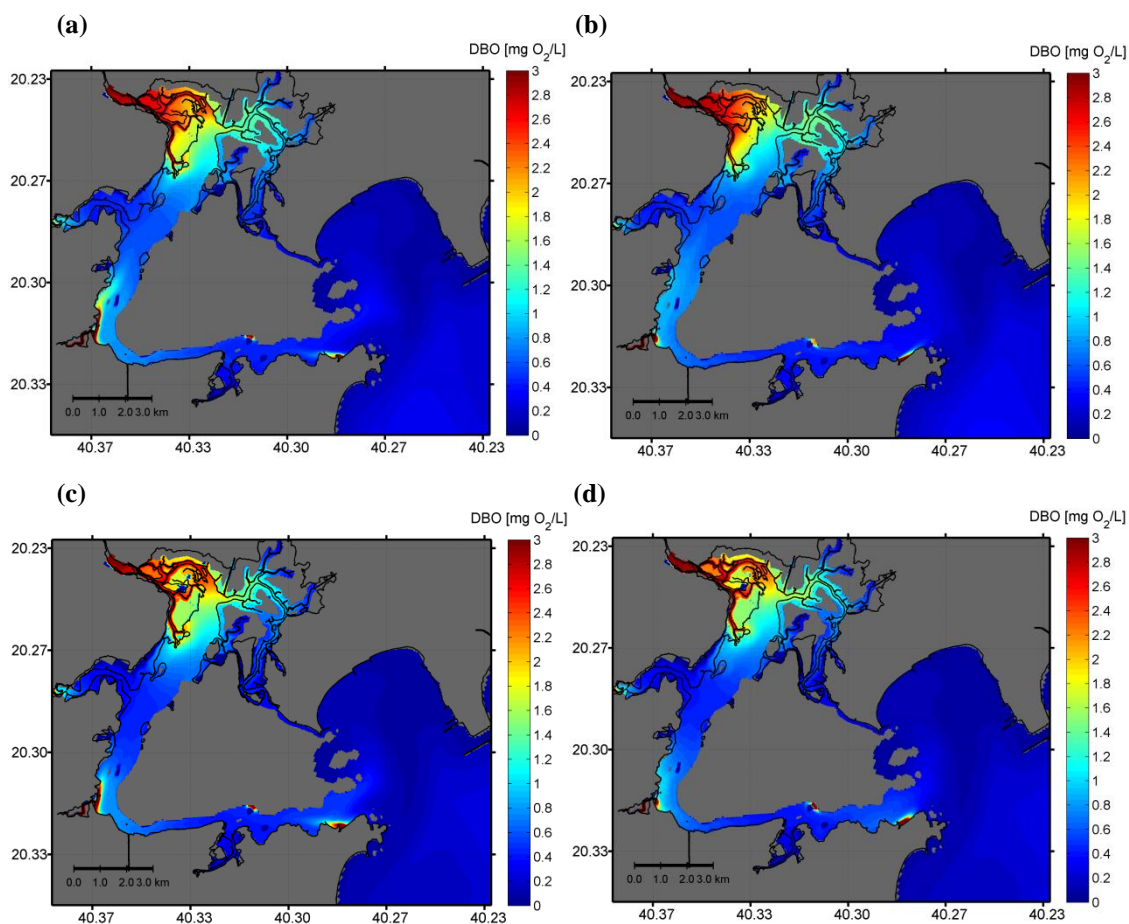


Figura 34: Concentração de DBO5 ($\text{mg O}_2/\text{L}$) modelada em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).

Para os diferentes momentos de maré, não ocorrem grandes diferenças nas concentrações de DBO5 na Baía de Vitória, visto que o aporte proveniente das fontes consideradas ao longo da baía é mais significativo que a contribuição da Baía do Espírito Santo, sendo observada, portanto, menor influência da maré para esta variável. Durante a enchente na sizígia, as cargas de DBO5 introduzidas na Baía de Vitória pelos

tributários são menos diluídas, com uma menor dispersão das plumas dentro da baía, em relação à vazante de sizígia. A maior diluição das plumas na vazante em relação à enchente, durante a sizígia, está associada com as maiores velocidades de corrente que ocorrem na vazante, em função da dominância local de correntes de vazante. Porém, durante a quadratura ocorre a inversão da dominância de correntes de vazante para de enchentes, o que condiciona a inversão dos padrões de diluição e extensão das plumas verificadas na sizígia.

Com relação ao ciclo sizígia/quadratura, as diferenças entre os mesmos momentos de maré (vazante ou enchente) também é dominada pelas diferenças nas velocidades. Como as velocidades durante a sizígia são superiores, nos instantes de sizígia avaliados ocorre uma maior diluição da DBO5, com uma maior extensão das plumas na baía.

O pequeno aumento da temperatura da água na vazante em relação à enchente observado nos resultados simulados, tanto na sizígia quanto na quadratura, pode proporcionar um discreto aumento momentâneo da taxa de mineralização, favorecendo o decaimento da DBO5.

Na Figura 35 é apresentado um momento crítico para a concentração de DBO5 na Baía de Vitória, referente à estofa da vazante da maré de quadratura (08:30h UTC – 30/06/2013).

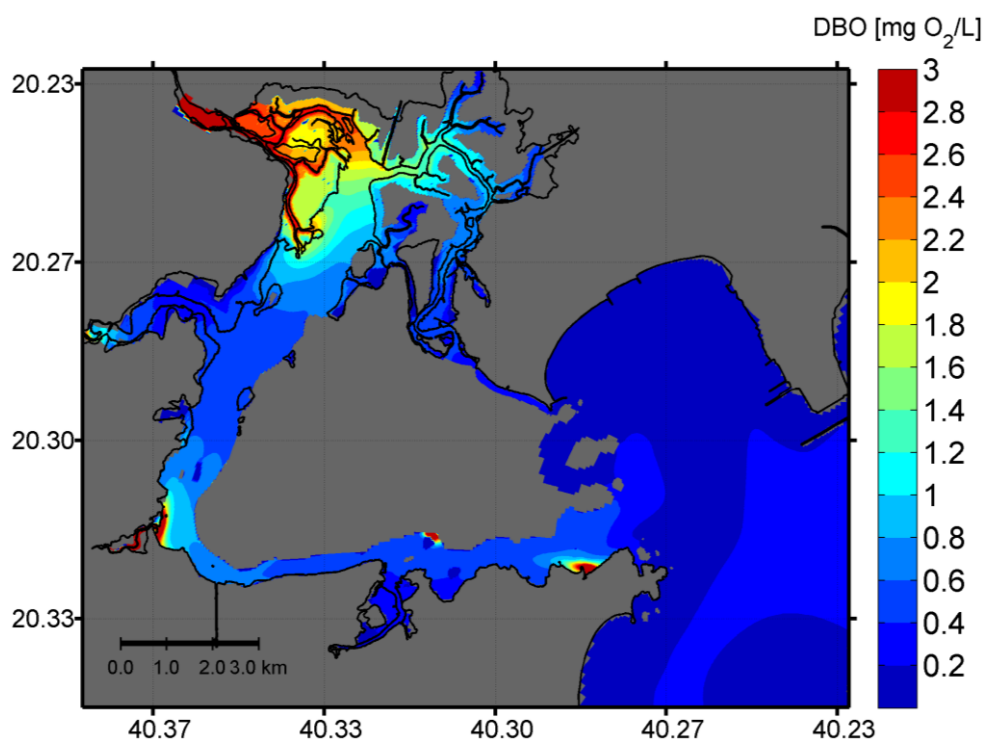


Figura 35: Momento crítico para a concentração de DBO5 (mg O₂/L) modelada ocorrente na estofa da vazante da maré de quadratura (08:30h UTC – 30/06/2013).

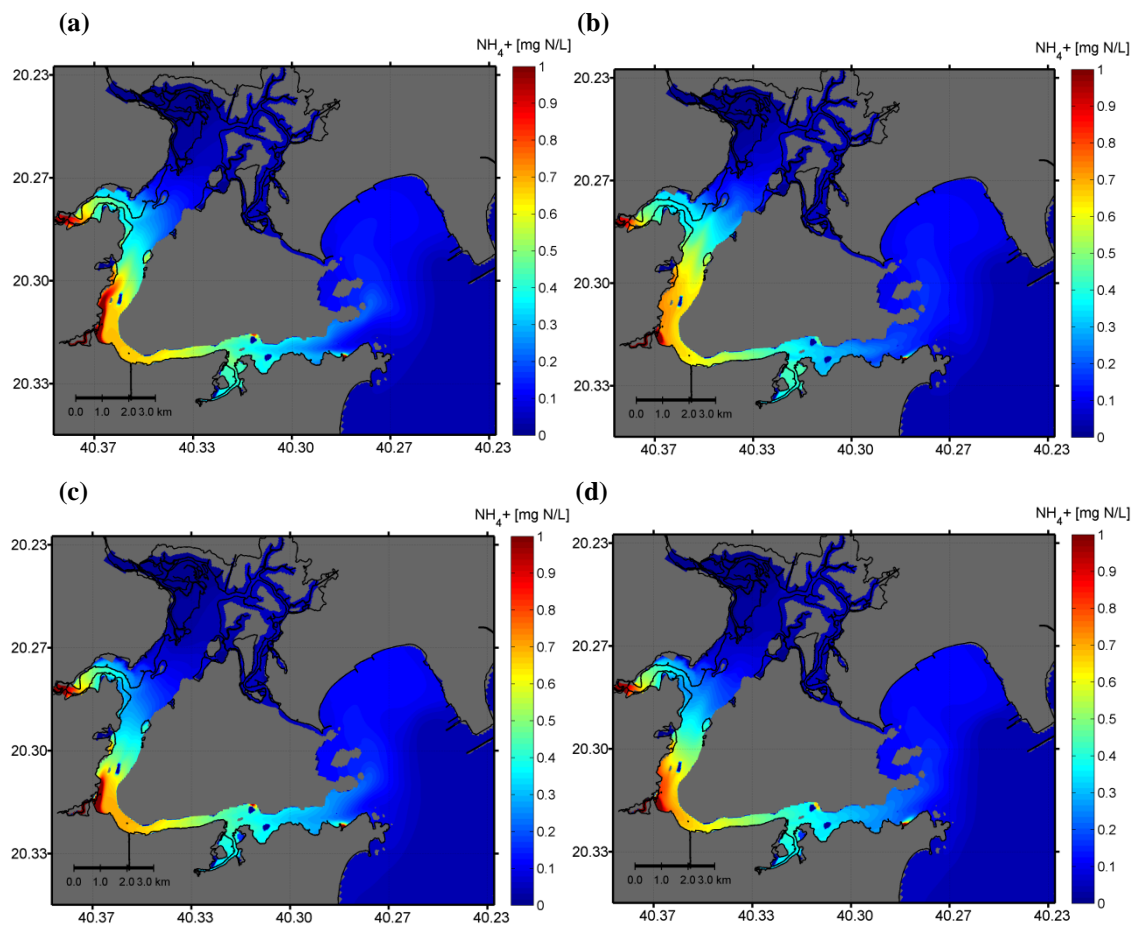
A condição de menor renovação das águas no interior da Baía de Vitória durante a maré de quadratura com o contínuo aporte de DBO₅ proveniente das principais fontes localizadas no interior da baía favorece para que nesse instante sejam verificados os mais altos valores de concentração, considerando também que trata-se de um momento de estofa da vazante, com diminuição da velocidade das correntes, que provoca menor diluição dos constituintes.

São verificadas as maiores concentrações de DBO₅ na Baía de Vitória próximo às seguintes fontes: Canal da Costa ([DBO₅] = 50 mg O₂/L); rio Itanguá ([DBO₅] = 40 mg O₂/L), galeria EBAP ([DBO₅] = 7 mg O₂/L). Os rios Marinho e Aribiri, apesar de também possuírem elevadas concentrações de DBO₅ (Marinho: [DBO₅] = 23 mg O₂/L; Aribiri: [DBO₅] = 35 mg O₂/L – Tabela 11), apresentaram menor influência no aumento da DBO₅ na baía, possivelmente devido às suas pequenas vazões, sendo sua carga de poluentes mais diluída ao entrar na baía.

Devido à ausência de valores de DBO na base de dados, não foi realizada verificação da modelagem para este constituinte, entretanto, os resultados obtidos encontram-se dentro da faixa de valores observados para o canal da Baía de Vitória, apresentada em Cassini (2011), que mostrou as concentrações deste constituinte com base nos monitoramentos realizados por CEPEMAR (2009) para quatro pontos monitorados em quatro campanhas no ano 2008, entre 0,8 e 5,29 mg O₂/L. A exceção ocorre apenas para as regiões muito próximas às fontes, que possuem elevada carga de DBO₅, a qual é diluída à medida que entra na Baía de Vitória.

5.5.3 Nitrogênio Amoniacal

Na Figura 36 é apresentada a concentração do íon amônio (NH₄⁺) e na Figura 37 é apresentada a concentração da amônia livre ou amônia não ionizada (NH₃) para os quatro instantes de menor velocidade das correntes durante a enchente e vazante para a maré de quadratura e de sizígia.



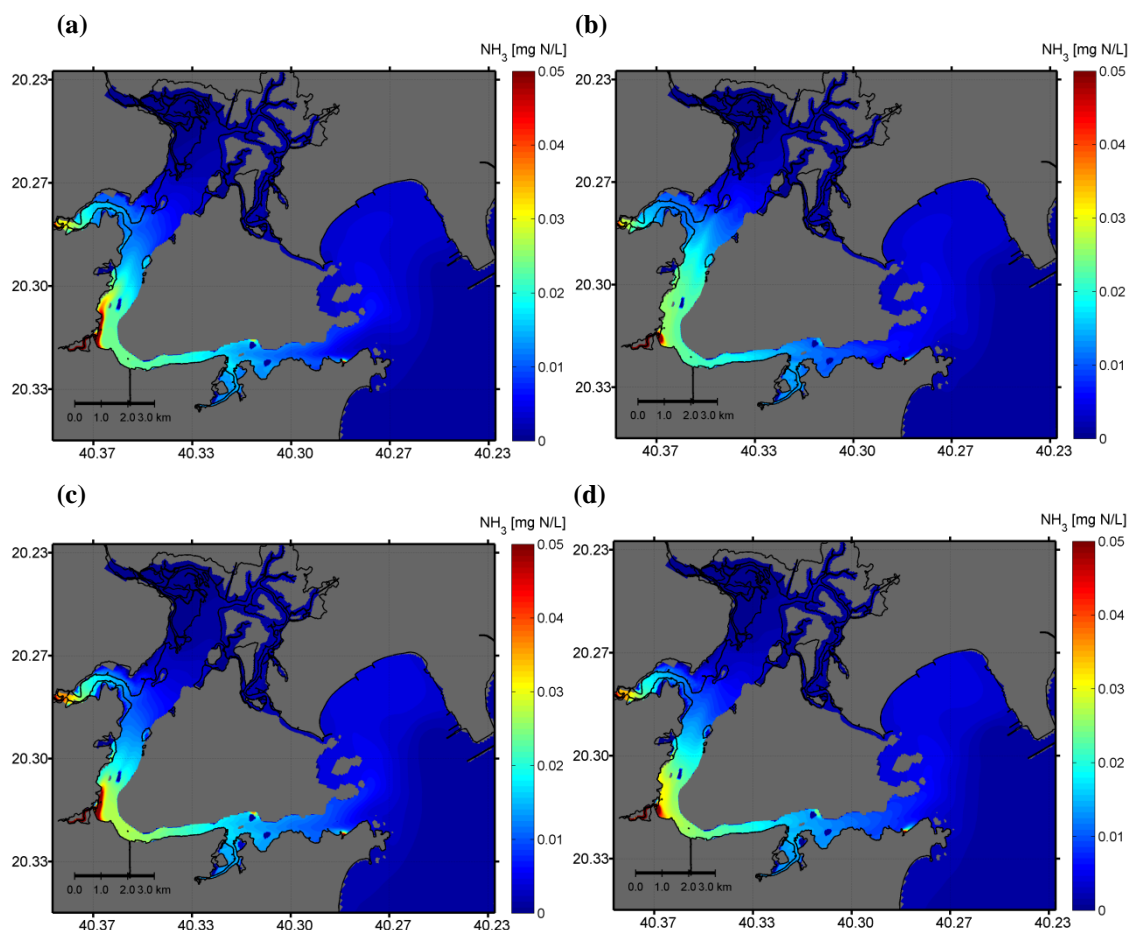


Figura 37: Concentração de NH_3 (mg N/L) modelada em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).

De forma semelhante à distribuição da DBO5, na distribuição de nitrogênio amoniacal, NH_4^+ e NH_3 , não ocorre diferença significativa entre os diferentes instantes de maré apresentados devido ao pequeno aporte de nitrogênio proveniente da Baía do ES em relação ao aporte proveniente das fontes localizadas na Baía de Vitória e, portanto, possivelmente essas distribuições são controladas principalmente pelas condições de vazão dos tributários e pluviosidade, mostrando pequeno efeito a modificação das condições hidrodinâmicas forçadas pela maré. Bianchi (2007) relata, com base nos trabalhos de Nixon (1995), Nixon *et al.* (1996), Boynton e Kemp (2000), Seitzinger *et al.* (2002) e Bouwman *et al.* (2005), que a entrada dominante de N total para os estuários tem se mostrado associada às descargas de água doce a partir dos rios, sendo esta característica também observada no presente estudo, visto que na distribuição de nitrogênio amoniacal na Baía de Vitória, são observados valores de concentração mais elevados nas regiões próximas às desembocaduras dos rios.

Castro *et al.* (2003) divide os sistemas estuarinos das bacias hidrográficas dos EUA em três classes segundo a quantificação das fontes dominantes de N para o estuário: dominados por fontes urbanas de N (pontuais, sépticas e escoamento superficial); dominados por fontes agrícolas de N (fertilização, fixação e resíduos de animais); e dominados por deposição atmosférica de N. A entrada de N para a Baía de Vitória via deposição atmosférica não foi considerada no presente estudo, entretanto, a boa aproximação dos resultados modelados de nitrogênio amoniacal com os valores observados na baía, mostrada na seção 5.2.2, indica que o sistema estuarino pode ser dominado por fontes urbanas (rios, galerias e canais) com contribuição de fontes agrícolas, principalmente para o rio Santa Maria da Vitória que, apesar de apresentar baixa concentração de N-NH_4^+ (0,01 mg/L), possui a maior concentração medida de NO_3^- (0,65 mg/L), evidenciando que o rio recebe aportes N em seu percurso, o qual é convertido a nitrito que, posteriormente é convertido a nitrato através do processo de nitrificação, demonstrando uma entrada de N mais antiga no sistema. Em contrapartida, os pequenos rios (Bubu, Itanguá, Aribiri e Marinho) que se concentram em regiões de grande influência da urbanização, as galerias e canais indicam uma dominância de fontes urbanas de N para a Baía de Vitória, e apresentam concentrações mais elevadas de N-amoniacal que, segundo von Sperling (2007), estão associadas a zonas de degradação ou de zonas decomposição ativa, em que o nitrogênio orgânico ainda está presente, entretanto, a maior parte já foi convertida a amônia.

A entrada de N através das bacias hidrográficas resultam em exportação de NID para os sistemas costeiros, como a Baía de Vitória, podendo levar a um aumento da produção primária, uma vez que os estuários são limitados por N (NIXON, 1995; BIANCHI, 2007), favorecendo a formação de florações algais, processos de eutrofização e diminuição dos níveis de OD.

Devido a um discreto aumento da temperatura da água na vazante em relação à enchente, tanto na sizígia quanto na quadratura, é possível que também ocorra um pequeno aumento momentâneo da taxa de nitrificação, processo em que NH_4^+ é convertido a NO_3^- , promovendo um maior decaimento da concentração de nitrogênio amoniacal e aumento da concentração de nitrato.

Na Figura 38 e Figura 39 são apresentados os momentos críticos para a concentração de NH_4^+ e NH_3 na Baía de Vitória, em que foram verificados os valores de concentração mais elevados durante o período de simulação. Os dois instantes ocorrem após a estofa da vazante da maré de quadratura, sendo o pico de NH_4^+ observado às 22:45h UTC do

dia 17/06 e o pico de NH_3 às 00:00h do dia 18/06/2013 com um atraso de 1h15min.

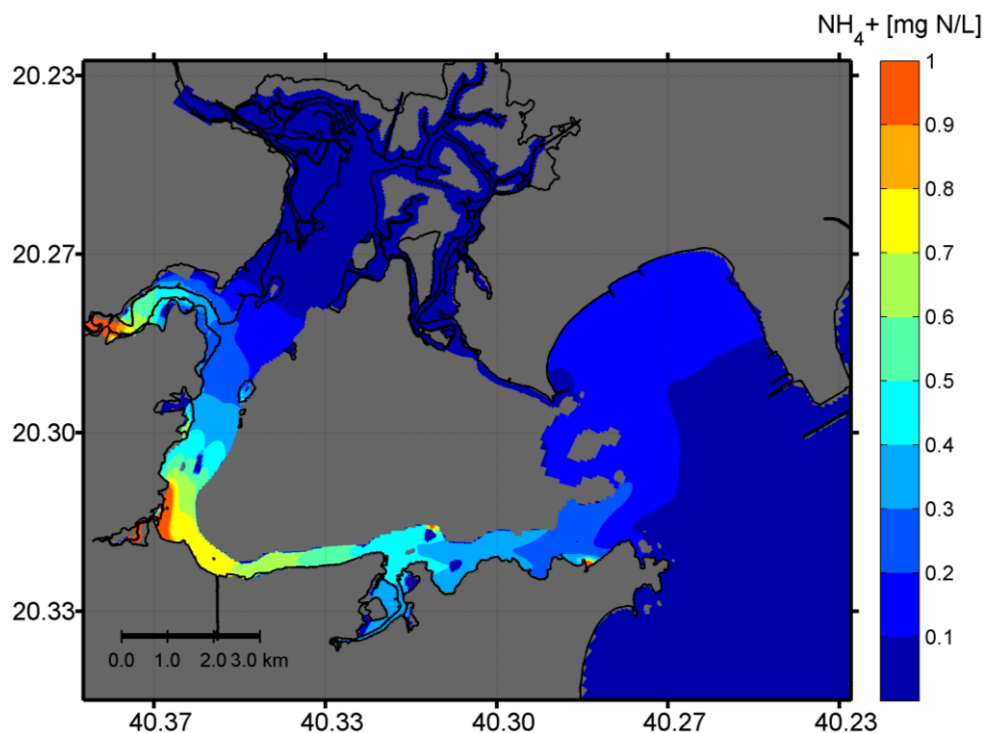


Figura 38: Momento crítico para a concentração de NH_4^+ (mg N/L) modelado ocorrente após estofa da vazante da maré de quadratura (22:45h UTC – 17/06/2013).

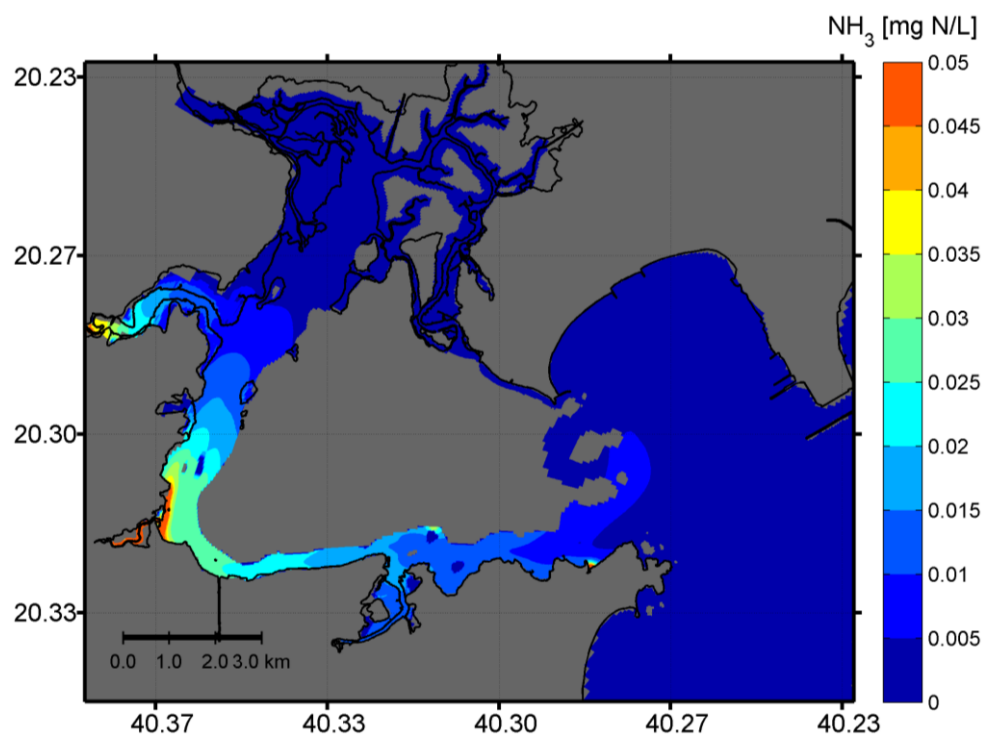


Figura 39: Momento crítico para a concentração de NH_3 (mg N/L) modelada ocorrente após estofa da vazante da maré de quadratura (00:00h UTC – 18/06/2013).

De forma similar aos cenários críticos anteriores, a condição hidrodinâmica de estofa da

vazante provoca diminuição da velocidade das correntes e a condição de maré de quadratura ocasiona menor renovação das águas da Baía de Vitória, diminuindo a diluição dos poluentes. Os valores de concentração de NH_4^+ e NH_3 são maiores nas regiões próximas às fontes, sendo observadas as concentrações mais elevadas próximo ao rio Itanguá ($[\text{NH}_4^+] = 25 \text{ mg N/L}$; $[\text{NH}_3] = 0,4 \text{ mg N/L}$), seguido do Canal da Costa ($[\text{NH}_4^+] = 4 \text{ mg N/L}$; $[\text{NH}_3] = 0,14 \text{ mg N/L}$) e da galeria EBAP ($[\text{NH}_4^+] = 1 \text{ mg N/L}$; $[\text{NH}_3] = 0,03 \text{ mg N/L}$).

As maiores concentrações de NH_4^+ em relação às concentrações de NH_3 são esperadas, uma vez que o íon NH_4^+ representa a maior fração do N total em estuários e zonas costeiras devido à forte ligação entre os sedimentos e a coluna d'água nesses ambientes comparado a ambientes de plataforma mais profundos (BIANCHI, 2007).

A Resolução 357/2005 do CONAMA estabelece o valor máximo de concentração de nitrogênio amoniacal total ($[\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3]$), sendo o limite para Águas Salobras Classe 1 de $0,4 \text{ mg N/L}$. Nos momentos críticos apresentados e ao longo de todo período de simulação, na região média da Baía de Vitória o nitrogênio amoniacal esteve acima do limite estabelecido, sendo encontrados valores de concentração muito elevados próximo a desembocadura do rio Itanguá, em torno de 25 mg N/L .

No ambiente aquático, a exposição à amônia livre (NH_3) pode ser altamente tóxica. A maioria dos peixes produzem amônia a partir do metabolismo de proteínas e, assim, níveis elevados no ambiente podem prejudicar a excreção da amônia ou provocar uma captação líquida de amônia a partir do ambiente, pois o aumento no organismo resulta em um desequilíbrio na regulação iônica que leva a hiper-excitabilidade, seguida de convulsões e morte (EDDY, 2005).

Segundo Eddy (2005), como a constante de equilíbrio da reação amônia/íon amônio varia com a temperatura, pressão e força iônica, a avaliação da amônia como um poluente nos estuários deve envolver experiências que determinem a resposta dos peixes segundo condições de salinidade e temperatura variando ao longo do tempo e para vários tipos de espécies. O mesmo autor reporta que ao avaliar a toxicidade da amônia em águas de diferentes salinidades, o ponto de partida tem sido considerar os padrões de qualidade da água aplicados a peixes de água doce. A toxicidade da amônia para espécies de peixes de água doce variam entre $0,068 - 2,0 \text{ mg/L}$ de NH_3 , similar a faixa para espécies marinhas, de $0,09 - 3,35 \text{ mg/L}$ de NH_3 e é provável que a toxicidade da amônia para peixes estuarinos esteja dentro dessas faixas (EDDY, 2005).

Considerando essa faixa de valores da literatura, a distribuição dos resultados de

concentrações de NH_3 na Baía de Vitória, mesmo no momento crítico, em que foram observadas as maiores concentrações, na maior parte da baía os valores ficam abaixo do limite mais restritivo para água doce, ou seja, $<0,068 \text{ mg/L}$ de NH_3 e, mesmo em regiões próximas à desembocadura do rio Itanguá, em que foram encontradas as maiores concentrações de nitrogênio amoniacal, com até $0,4 \text{ mg/L}$ de NH_3 , os valores ainda estão dentro da faixa de não toxicidade reportada na literatura. Ainda assim, os resultados devem ser avaliados cuidadosamente, considerando que os cálculos das concentrações de NH_3 pelo modelo numérico, além de computar os valores de temperatura e salinidade, também utiliza o valor do pH, para o qual foi atribuído um valor médio calculado a partir dos dados de análises físico-químicas de amostras de água da Baía de Vitória (Tabela 6). Estudos mostram que a toxicidade da amônia é mais influenciada pelas diferenças entre espécies e pH, com menor influência da temperatura e salinidade (EDDY, 2005).

5.5.4 Nitrato

Na Figura 40 é apresentada a concentração de nitrato (NO_3^-) para os quatro instantes de menor velocidade das correntes durante a enchente e vazante para a maré de quadratura e de sizígia.

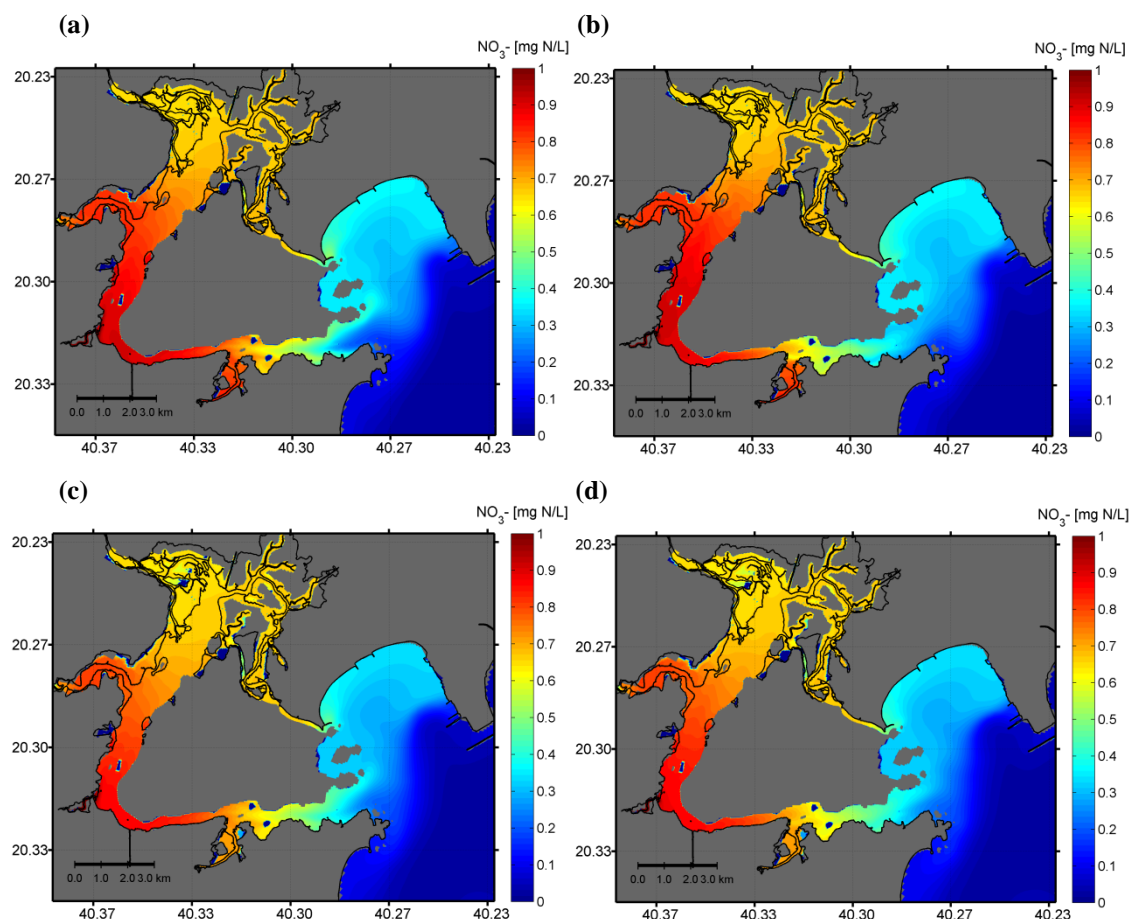


Figura 40: Concentração de NO_3^- (mg N/L) modelado em quatro momentos: (a) máxima velocidade de enchente na maré de sizígia (16:30h – 24/06/2013); (b) máxima velocidade de vazante na maré de sizígia (10:00h – 24/06/2013); (c) máxima velocidade de enchente na maré de quadratura (20:30h – 15/06/2013); (d) máxima velocidade de vazante na maré de quadratura (03:00h – 16/06/2013).

A única variável que apresentou valores simulados fora da faixa de valores observados na literatura foi o nitrato, sendo as concentrações superestimadas na maior parte dos pontos observados, mesmo em regiões que não apresentaram influência significativa do processo de nitrificação, que adiciona NO_3^- ao sistema. Conforme explicado na seção 5.2.3, as fontes de NO_3^- foram consideradas segundo os aportes fluviais fornecidos de acordo com os dados Monitoramento Qualitativo das Bacias Hidrográficas do rio Santa Maria da Vitória e do rio Jucu (Tabela 9).

Como verificado para o nitrogênio amoniacal, a distribuição de NO_3^- na Baía de Vitória também não é significativamente influenciada pela maré devido ao pequeno aporte de nitrogênio proveniente da Baía do ES em relação ao aporte proveniente das fontes localizadas na Baía de Vitória. É provável que as condições de vazão dos tributários e pluviosidade sejam as principais forçantes locais para a distribuição desse constituinte, podendo ocorrer aumento nas concentrações de nitrogênio amoniacal e nitrato durante

eventos de maior vazão dos rios, associados a períodos chuvosos que, por sua vez, também podem elevar as descargas provenientes das galerias pluviais presentes nas margens da Baía de Vitória.

Na Figura 41 é apresentado um momento crítico para a concentração de NO_3^- , em que foram verificados os maiores valores de concentração durante o período simulado, referente a um instante após a estufa da vazante da maré de quadratura (09:10h UTC – 30/06/2013), contribuindo para este cenário as menores velocidades das correntes, que dificultam a dispersão das plumas provenientes das fontes no interior da Baía de Vitória, e a menor entrada das águas da Baía do ES. Os dois fatores promovem a menor diluição do NO_3^- na Baía de Vitória, resultando em concentrações mais elevadas próximas às fontes e plumas de menor abrangência espacial.

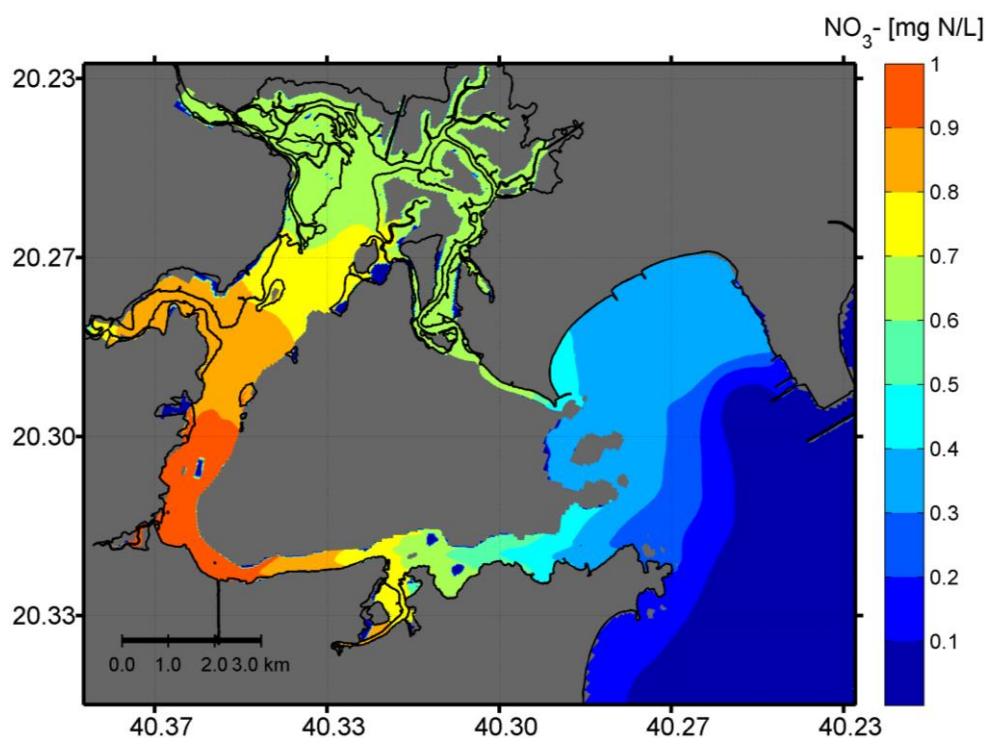


Figura 41: Momento crítico para a concentração de NO_3^- (mg N/L) modelado ocorrente após estufa da vazante da maré de quadratura (09:10h – 30/06/2013).

Os valores de concentração de NO_3^- são maiores nas regiões próximas à desembocadura dos seguintes tributários: rio Itanguá ($[\text{NO}_3^-] = 1,4 \text{ mg N/L}$), rio Bubu ($[\text{NO}_3^-] = 0,9 \text{ mg N/L}$) e rio Aribiri ($[\text{NO}_3^-] = 0,8 \text{ mg N/L}$).

A Resolução 357/2005 do CONAMA estabelece o valor máximo de concentração de NO_3^- de de $0,40 \text{ mg N/L}$ para Águas Salobras Classe 1. Nos momentos críticos

apresentados e ao longo de todo período de simulação, em todo canal da Baía de Vitória, com exceção da região próxima a sua desembocadura, foram observados valores de concentração NO_3^- predominantemente acima do limite estabelecido; entretanto, é importante considerar que as concentrações modeladas deste constituinte foram superestimadas na maior parte dos pontos de monitoramento da Baía de Vitória, conforme verificação apresentada na seção 5.2.3.

Nas análises laboratoriais utilizadas para verificação dos resultados da modelagem numérica, o NO_3^- não foi detectado em nenhum ponto de observação, tanto em superfície quanto em fundo, com um limite de detecção de 0,3 mg N/L. Portanto, considerando o cálculo de um MAE mínimo de 0,31 mg N/L entre os dados medidos e modelados espera-se que, na realidade, o constituinte não fique acima do valor máximo estabelecido pela Resolução CONAMA 357/2005 para toda a Baía de Vitória, como mostram os resultados de simulação. Para uma avaliação mais segura deste parâmetro, são necessários maiores esforços de amostragem *in situ*, visto que foi mostrado neste estudo que, mesmo isento dos efeitos da nitrificação que adiciona NO_3^- ao sistema, este permaneceu acima da faixa de valores observados, possivelmente devido aos valores de concentração impostos nos contornos através dos tributários. O mesmo padrão de superestimação foi relatado por Cassini (2011) utilizando a mesma base de dados medidos adotados no presente estudo para o NO_3^- . Outra possível fonte de erro está associada a não consideração dos processos de crescimento e mortalidade de algas na modelagem numérica. O crescimento algal envolve a captação de nutrientes inorgânicos, incluindo compostos de nitrogênio como NH_4^+ e NO_3^- , com um consumo preferencial de NH_4^+ (DELTARES, 2014d). A captação pelas algas poderia, portanto, promover a diminuição da concentração de NO_3^- na coluna d'água. Por outro lado, a mortalidade das algas volta a adicionar detritos de nitrogênio ao sistema (DELTARES, 2014d).

6 CONCLUSÕES

Foi implantado um sistema de modelagem hidrodinâmica e da qualidade da água para o Sistema Estuarino da Ilha de Vitória (SEIV), sendo avaliada a simulação para o período de 01/06 a 30/06/2013. O modelo hidrodinâmico foi avaliado quanto à representação das correntes, da elevação, da temperatura e da salinidade. Na modelagem da qualidade da água, foram considerados constituintes que participam do balanço de oxigênio

dissolvido (íon amônio – NH_4^+ , amônia livre – NH_3 , nitrato – NO_3^- , Demanda Bioquímica de Oxigênio – DBO5 e oxigênio dissolvido – OD) com os processos de nitrificação, mineralização e reaeração, sendo avaliado: a influência dos processos considerados na adição ou remoção dos constituintes em pontos nas regiões superior, média e inferior da Baía de Vitória; o efeito das fontes pontuais urbanas localizadas no interior da Baía de Vitória no balanço de oxigênio dissolvido; a distribuição espacial das concentrações dos constituintes em instantes de maior dispersão e maior diluição e em instante crítico para a concentração do constituinte avaliado.

- A avaliação dos resultados hidrodinâmicos, de correntes e de elevação, por meio do coeficiente de correlação de Pearson (r), erro absoluto médio (MAE), erro médio quadrático (RMS) e índice de concordância de Wilmot (Id) foi satisfatória, com a ocorrência dos parâmetros estatísticos dentro da faixa reportada na literatura.
- A avaliação dos resultados de temperatura e salinidade, por meio do erro absoluto médio (MAE) e erro percentual absoluto médio (MAPE) em relação aos dados observados, mostrou que os resultados também foram satisfatórios, sendo observada uma discreta melhora na representação da salinidade em relação a estudo de modelagem numérica anterior realizado para a área de estudo.
- Entre os processos avaliados, a reaeração foi um importante processo de introdução de OD na Baía de Vitória, sendo até 53% do OD adicionado por esse processo na região média estuarina. Já a mineralização, associada ao decaimento da DBO5, foi o principal processo de perda de OD, chegando a -19% na região média estuarina, o que pode ser atribuído à elevada carga de DBO5 que chega a esta região. A nitrificação também foi maior para esta região, onde 11% do OD foram removidos por esse processo. Os rios Santa Maria da Vitória e Bubu, que exercem maior influência na região superior estuarina, possuem menor concentração de nitrogênio amoniacal e DBO5 em relação às demais fontes presentes na região média a inferior da Baía de Vitória, como os rios Itanguá, Marinho e Aribiri, além do Canal da Costa e galerias que levam águas de qualidade inferior ao interior da baía. Portanto, foi observada uma maior deterioração da qualidade da água na região média do estuário.
- A redução de OD devido às fontes pontuais consideradas, galerias dispostas nas

margens da Baía de Vitória, mesmo nos pontos mais próximos selecionados, foi pouco significativa no período de simulação (de até -2,1% na região da galeria da EBAP da CESAN), o que indica que a concentração de OD na Baía de Vitória pode ser influenciada principalmente pelos aportes de nitrogênio e DBO5 provenientes de seus tributários: rios e canais afluentes à baía que possuem elevadas concentrações desses constituintes. Assim, é provável que as condições de vazão dos tributários e pluviosidade sejam as principais forçantes locais para a distribuição desses constituintes e para o balanço de oxigênio dissolvido, podendo ocorrer aumento nas concentrações dos contaminantes durante eventos de maior vazão dos rios, associados a períodos chuvosos que, por sua vez, também podem elevar as descargas provenientes das galerias pluviais presentes nas margens da Baía de Vitória e provocar decaimento nos níveis de OD. É importante destacar que o presente estudo considerou cargas estimadas a partir de dados populacionais para cada fonte pontual, sendo inexistentes dados de livre acesso medidos e, portanto, as cargas, bem como a redução de OD, podem ter sido subestimadas ou superestimadas;

- Na análise da distribuição espacial dos constituintes na Baía de Vitória em relação às condições de maré de quadratura/sizígia e enchente/vazante, foi observado que: durante a sizígia, o maior volume de água proveniente da Baía do Espírito Santo com elevada concentração de OD e menor carga de nitrogênio e DBO5 promove um aumento nos níveis de OD; durante a sizígia ocorre um aumento da diluição das plumas, favorecida pelas maiores magnitudes das velocidades das correntes nesse período, sendo observadas plumas de maior extensão; em função da dominância local de vazante na sizígia, nesses períodos foi observada uma maior dispersão das plumas dentro da Baía de Vitória, porém, durante a quadratura ocorre a inversão da dominância de correntes de vazante para de enchentes, o que condicionou a inversão dos padrões de diluição e extensão das plumas verificadas na sizígia; todos os momentos críticos para a concentração dos constituintes ocorreram em períodos de quadratura, durante ou próximo a estufa de vazante, configurando um cenário de menor diluição associado às menores magnitudes das velocidades na quadratura, que promovem uma menor dispersão das plumas, e à menor amplitude da maré na quadratura, que leva menor volume de água para a Baía de Vitória a partir da Baía do Espírito Santo, sendo esta responsável pelo aporte de águas com baixa

concentração de nutrientes e DBO5 e elevada concentração de OD em relação aos demais contornos.

- Segundo os resultados da modelagem numérica com as considerações e condições assumidas no presente estudo, as principais fontes que contribuíram para a deterioração da qualidade da água da Baía de Vitória foram: rio Itanguá e Canal da Costa. Os demais rios considerados no contorno apresentaram contribuições menos significativas, seja por melhores condições de qualidade da água (Santa Maria e Bubu) ou por pequenas vazões (Marinho e Aribiri), sendo as cargas destes últimos rapidamente diluídas ao entrar na baía;
- Os resultados obtidos mostraram que o sistema de modelagem numérica implantado pode ser uma ferramenta útil para a previsão e avaliação de impactos na qualidade da água da Baía de Vitória.

7 REFERÊNCIAS

ALLEN, J. J., SOMERFIELD, P. J., GILBERT, F. J. Quantifying uncertainty in high resolution coupled hydrodynamic-ecosystem models. *Journal of Marine Systems*, v. 64, p. 3-14, 2007.

AMBROSE, R. B.; WOOL, T. A.; CONNOLLY, J. P. *WASP4, A Hydrodynamic and Water Quality Model - Model Theory, User's Manual and Programmer's Guide*, US Environmental Protection Agency, Athens, Ga, USA, 1988.

AMBROSE, R. B.; WOOL, T. A.; MARTIN, J. L. *WASP5 X, A Hydrodynamic and Water Quality Model - Model Theory, User's Manual and Programmer's Guide*, Environmental Research Laboratory, US Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA, 1993.

ANA (Agência Nacional de Águas). Bacias Hidrográficas do Atlântico Sul Trecho Leste: Sinopse de informações do Rio de Janeiro, Espírito Santo, Bahia e Sergipe. Disponível em: <hidroweb.ana.gov.br/cd4/es.doc>. Acesso em: 13 jan. 2015

BANKS, R.; HERRERA, F. Effect of wind and rain on surface reaeration. *ASCE. Journal of the Environmental Engineering Division*, v. 103, n. 3, p. 489-504, 1977.

BAPTISTELLI, S. C. *Análise crítica da utilização de modelagem matemática na avaliação da dispersão de efluentes leves no litoral da Baixada Santista (Estado de São Paulo)*. 2008. 314 f. Tese (Doutorado) - Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo. 2008.

BARRETO, F. T. C. *Estudo da resposta do campo de escoamento à variação da velocidade das correntes de contorno oeste no Embaimento de Tubarão - ES*. 2014. 88 f., Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2014.

BARROS, M. L. C. *Modelagem hidrodinâmica e de qualidade de água em corpos de água com alagamento e secamento*. 2012. 170 p., Tese (Doutorado) - Programa de Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, 2012.

BARROS FILHO, G. C. *Identificação dos Processos Físicos na Hidrodinâmica das Águas do Entorno da Ilha de Vitória – ES*. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, Brasil, 2002.

BASTOS *et al.* Dinâmica Sedimentar e Morfologia de Fundo do Sistema Estuarino de Vitória, ES. In: Simpósio Baías – Associação Brasileira de Estudos do Quaternário, 2, 2007. Anais... Disponível em: <http://www.abequa.org.br/mostra_sessao.php?sessao=11>. Acesso em: 1 Nov. de 2014.

BERMAN, T.; BRONK, D. A. Dissolved organic nitrogen: a dynamic participant in aquatic ecosystems. *Aquatic Microbial Ecology*, v. 31, p. 279-305, 2003.

BEROUNSKY, V. M.; NIXON, S. W. Rates of nitrification along an estuarine gradient in Narragansett Bay. *Estuaries*, v. 16, n. 4, p. 718–730, 1993.

BIANCHI, T. S. *Biogeochemistry of Estuaries*. Oxford. University Press, 2007.

BORCHARDT, J. A. *Nitrification in the Activated Sludge Process The Activated Sludge Process in Sewage Treatment Theory and Application*. Univ. of Michigan Dept. of Civil Eng., Ann Arbor, MI, 1966.

BOYNTON, W. R.; KEMP, W. M. Influence of River Flow and Nutrient Loads on Selected Ecosystem Processes – A Synthesis of Chesapeake Bay Data. In: Hobbie, J. E. (Ed), *Estuarine Science: A Synthetic Approach to Research and Practice*, p. 269-298, Island Press, Washington, DC, 2000.

BOUWMAN, A. F.; VAN DER HOEK, K. W.; OLIVIER, J. G. J. Uncertainties in the global sources distribution of nitrous oxide. *Journal of Geophysical Research*, v. 100, p. 2785–2800, 1995.

BOUWMAN, A. F.; VAN DRECHT, G.; KNOOP, J. M.; BEUSEN, A. H. W.; MEINARDI, C. R. Exploring changes in river nitrogen export to the world's oceans. *Global Biogeochemical Cycles*, v. 19, GB 1002, 2005.

BOWIE, G. L.; MILLS, W. B.; PORCELLA, D. B.; CAMPBELL, C. L.; PAGENKOPF, J. R.; RUPP, G. L.; JOHNSON, K. M.; CHAN, P. W. H.; GHERINI, S. A. Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling (Second Edition). Technical Report EPA-600/3-85-040, USEPA, 1985.

BRANT, P. G. C. *Modelagem hidrodinâmica ambiental de dragagem no canal de acesso ao Porto de Tubarão e na região de bota fora* – ES. 2004. f.136, Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Oceânica, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2012.

BROWN, L. C.; BARNWELL JR., T. O. *The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAD: Documentation and User Manual*, US Environmental Protection Agency, Environmental Research Laboratory, Athens, Ga, USA, 1987.

CAMERON, W. M.; PRITCHARD, D. W. Estuaries. In: HILL MN (Ed.). *The sea: ideas and observations on progress in the study of the seas*. Interscience, New York, p. 306-324, 1963.

CAMP, T. R. *Water and Its Impurities*, Reinhold, New York, NY, USA, 1963.

CASSINI, P. S. *Aplicação do modelo EPA-Aquatox à Baía de Vitória (Vitória/ES)*. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2011.

CASTRO, M. S. M.; CHACALTANA, J. T. A.; TEIXEIRA, E. C.; RIGO, D. Avaliação da contribuição de esgoto doméstico para a qualidade da água da Baía do Espírito Santo utilizando monitoramento e modelagem de coliformes fecais. In: 21º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, João Pessoa: ABES, 2001.

CASTRO, M. S.; DRISCOLL, C. T.; JORDAN, T. E.; REAY, W. G.; BOYNTON, W.R. Sources of nitrogen to estuaries in the United States. *Estuaries*, v. 26, p. 803–814, 2003.

CEPEMAR. Relatório consolidado das 4 campanhas relativas ao monitoramento do canal da Baía de Vitória. Vitória, RT 021/09, 2009.

CHACALTANA, J. T. A.; MARQUES, A. C.; RIGO, D.; PACHECO, C. G. Influência do manguezal no padrão de escoamento do sistema estuarino da ilha de Vitória – ES. V Semana Estadual de Meio Ambiente (SESMA), Vitória, 2003.

CERCO, C. F.; Estimating Estuarine Reaeration Rates. *Journal of Environmental Engineering*, v. 115, n.5, p. 1066-1070, 1989.

CHASSIGNET *et al.* US GODAE: Global Ocean Prediction with the Hybrid Coordinate Ocean Model (HYCOM). *Oceanography*, 22, n. 2, p. 64-75, 2009.

CHEN, Q.; MYNETT, A. E. Modelling algal blooms in the Dutch coastal waters by integrated numerical and fuzzy cellular automata approaches. *Ecological Modelling*, v. 199, n. 1, p. 73-81, 2006.

CONLEY, D. J.; SMITH, W. M.; BOYNTON, W. R. Transformation or particle-bound phosphorus at the land sea interface. *Estuarine Coastal and Shelf Science*, 40, 161-176, 1995.

CONLEY D J. River contribution of biogenic silica to the oceanic silica budget. *Limnology and Oceanography*, v. 42, n. 2, p. 774–777, 1997.

D'AGOSTINI, D. P. *Fácies sedimentares associadas ao sistema estuarino da Baía de Vitória (ES)*. 2005. Monografia (Graduação) – Departamento de Ecologia e Recursos Naturais da Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2005.

DAY, J. W.; CRUMP, B. C.; KEMP, W. M.; Yáñez-Arancibia, A. *Estuarine Ecology*. Wiley: New York, 2013.

DE GOEDE, E. D.; ROOZEKRANS, J. N.; DE KOK, J. M.; VOS, R. J.; UITTENBOGAARD, R. E. REST3D – Remote Sensing Sea Surface Temperature for 3D North Sea Modelling. WL | Delft Hydraulics Report, NRSP-2 00-16. 2000.

DELTARES. *Delft3D-FLOW: User Manual*. Versão: 3.15.30932. The Netherlands, 2014a.

DELTARES. *D-Water Quality: User Manual*. Versão: 4.99.31050. The Netherlands, 2014b.

DELTARES. *D-Water Quality: Processes Library Tables, Technical Reference Manual*. Versão: 5.01.28508. The Netherlands, 2014c.

DELTARES. *D-Water Quality: Detailed description Of Processes, Technical Reference Manual*. Versão: 5.01.33319. The Netherlands, 2014d.

DHI – DANISH HYDRAULICS INSTITUTE. *MIKE11, User Guide & Reference Manual*, Danish Hydraulics Institute, Horsholm, Denmark, 1993.

DHI – DANISH HYDRAULICS INSTITUTE. Eco Lab. Disponível em: <<https://www.mikepoweredbydhi.com/products/eco-lab>>. Acesso em: 18 jun. 2016

DIEGUES, A. Human populations and coastal wetlands: conservation and management in Brazil. *Ocean & Coastal Management*, v. 42, p. 187-210, 1999.

DOBBINS, W. E. BOD and oxygen relationships in streams. *Journal of Sanitary Engineering Division*, American Society of Civil Engineers, v. 90, n. 3, p. 53–78, 1964.

EDDY, F. B. Ammonia in estuaries and effects on fish. *Journal of Fish Biology*, v. 67, n. 6, p. 1495-1513, 2005.

EL-ADAWY, A.; NEGM, A. M.; SAAVEDRA, O. C.; NADAOKA, K.; EL-SHINNAWY, I. A. Coupled Hydrodynamic-Water Quality Model for Pollution Control Scenarios in El-Burullus Lake (Nile Delta, Egypt). *American Journal of Environmental*

Sciences, v. 10, n. 6, p. 549-568, 2014.

EMERY, W. J.; TALLEY, L. D.; PICKARD, G. L. Descriptive Physical Oceanography. Elsevier. 2006.

EPA (US Environmental Protection Agency). WASP. Disponível em: <<http://www.epa.gov/athens/wwqtsc/html/wasp.html>>. Acesso em: 18 dez. 2014.

EGBERT, G. D.; EROFEEVA, S. Y. Efficient inverse modeling of barotropic ocean tides. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, p. 183-204, 2002.

ERICKSON, R.J. An evaluation of mathematical models for the effects of pH and temperature on ammonia toxicity to aquatic organisms. *Water Research*, n. 19, p. 1047-1058, 1985.

FALKENBERG, A. V. *Estudo da dispersão, mistura e qualidade da água do Complexo Estuarino de Paranaguá com uso de Modelagem Numérica*. 2009. 137 f., Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Sistemas Costeiros e Oceânicos, Universidade Federal do Paraná, Pontal do Sul. 2009.

FISHER, H. B. Mass transports mechanisms in partially stratified estuaries. *Journal of Fluid Mechanics*, 53, p. 671-687, 1972.

FITZPATRICK, J.; IMHOFF, J. Water Quality Models: A Survey and Assessment. *Project 99 - WSM - 5 by Water Environment Research Foundation*. v. 102, 2001.

FROELICH, P. N.; BENDER, M. L.; LUEDTKE N. A.; HEATH, G. R.; DEVRIES, T. The marine phosphorus cycle. *American Journal of Science*, v. 282, p. 474-511, 1982.

GARÇÃO, H. F.; CHACALTANA, J. T. A. Estudo da hidrodinâmica e salinidade na Baía de Vitória (ES) através de modelagem computacional. In: XVIII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, Campo Grande - MS. 2009.

GARCIA, G. E.; GONÇALVES, J. E. Implementação de Modelo Numérico para Avaliação do Transporte de Sedimentos no Reservatório de Itaipu — PR. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 16, n. 3, 2011.

GAZE, F. Tempo de residência na Baía do Espírito Santo. Monografia de Graduação em Oceanografia. Universidade Federal do Espírito Santo. Vitória, 2005.

GEMSS (Generalized Environmental Modeling System for Surfacewaters). Disponível em: <<http://gemss.com/>>. Acesso em: 27 dez. 2014.

GERRITSEN, H.; de GOEDE, E. D.; PLATZEK, F. W.; GENSEBERGER, M.; VAN KESTER, A. Th. M.; UITTENBOGAARD, R. E., 2007. *Validation Document Delft3D-FLOW*. A software system for 3D flow simulations: report. 2007.

GILL, A. E. Atmosphere-Ocean Dynamics. International Geophysical Series, v. 30. Academic Press. 1982.

GOLDMAN, J. C; MCCARTHY, J. J.; PEAVEY, D. G. Growth rate influence on the chemical composition of phytoplankton in oceanic waters. *Nature*, Lond., v. 279, n. 5710, p. 210-215, 1979.

GRENNEY, W. J., TEUSCHER, M. C., DIXON, L. S. Characteristics of the solution algorithms for the QUAL II river model. *Journal of the Water Pollution Control Federation*, v. 50, n. 1, p. 151-157, 1978.

HABITEC Engenharia Sanitária e Ambiental Ltda. *Diagnóstico do Plano Diretor das Bacias dos rios Santa Maria da Vitória e Jucu*. Relatório Diagnóstico – Vol. 1, 2 e 3, disponível em Consórcio Rio Santa Maria e Jucu, Vitória, 1997.

HANSEN, D. V.; RATTRAY, M. Gravitational circulation in straits and estuaries. *Journal of Marine Research*, v. 12, p. 104-122, 1965.

HARARI, J.; FERREIRA, F. R.; DEGASPARI, F. A.; SARTOR, S. M. Modelagem Numérica Hidrodinâmica e da Dispersão de Esgoto na Baía de Santos, SP. RBRH – *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 18, n. 1, p. 205-214, 2013.

HARLEMAN, D. R. F.; DAILEY, J. E.; THATCHER, M. L.; NAJARIAN, T. O.; BROCARD, D. N.; FERRARA, R. A. *User's Manual for the M.I.T. Transient Water Quality Network Model – Including Nitrogen Cycle Dynamics for Rivers and Estuaries*. R. M. Parsons Laboratory for Water Resources and Hydrodynamics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts. For U.S. Environmental Protection

Agency, Corvallis, Oregon. EPA-600/3-77-010, 1977.

HEKSTRA, M. *Water Quality modeling of a mangrove system in Singapore*. 2013. Master Degree Dissertation - Civil Engineering and Geosciences, Hydraulic Engineering, 2013.

HIDROWEB (Sistema de Informações Hidrológicas). Agência Nacional de Águas – ANA. Disponível em < <http://hidroweb.ana.gov.br/>>. Acessado em: 14 nov. de 2014.

HOBBIE, J.E. The Key to Progress in Coastal Ecological Research. In: *Estuarine Science: a synthetic approach to research and practice*. Washington, D.C., Island Press, 2000.

HYDROSCIENCE, INC. *Addendum to Simplified Mathematical Modeling of Water Quality*. U.S. Environmental Agency, 1972.

JAMES, A. *An Introduction to Water Quality Modelling*, John Wiley and Sons Ltd, Chichester, West Sussex, 1993.

JESUS, L. C. Estudo da maré barotrópica e da geração de maré baroclínica para a região costeira e oceânica ao largo da costa do Espírito Santo. 2014. 77 f., Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2014.

JONES, H. F. E.; HAMILTON, D. P. Assessment of the Waikato River estuary and delta for whitebait habitat management: field survey, GIS modelling and hydrodynamic modelling. Waikato Regional Council. Environmental Research Institute Report n. 27, University of Waikato. 2014.

JOYE, S. B.; PAERL, H. W. Nitrogen cycling in microbial mats: rates and patterns of denitrification and nitrogen fixation. *Marine Biology*, v. 119, p. 285-295, 1994.

JORGENSEN, S. E. *Fundamentals of Ecological Modelling*. Amsterdam: Elsevier, 1994.

KERNKAMP, H. W. J.; SMITS, J. G. C. Preparation Preliminary Model Lake Malawi/Nyasa. University of Waterloo, UNU/INWEH, WL | Delft Hydraulics, T2380.

2000.

KOLMOGOROV, A. N. Equations of turbulent motion in incompressible fluid. *Izv. Akad. Nauk. SSR, Seriafizicheskaya* Vin.1 2 (1-2): 56–58, 1942. Tradução: 1968 Imperial College, Mech. Eng. Dept. Rept. ON/6.

KROEZE, C.; SEITZINGER, S. P. Nitrogen inputs to rivers, estuaries and continental shelves and related nitrous oxide emissions in 1990 and 2050: a global model. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, v. 52, p. 195-212, 1998.

KUANG *et al.* Numerical prediction of medium-term tidal flat evolution in the Yangtze Estuary: impacts of the Three Gorges Project. *Continental Shelf Research*, v. 52, p. 12-26, 2013.

LAMONTAGNE, M. G.; ASTORGA, V.; GIBLIN, A. E.; VALIELA, I. Denitrification and the Stoichiometry of Nutrient Regeneration in Waquoit Bay, Massachusetts. *Estuaries*, v. 25, n. 2, p. 272-281, 2002.

LANE, A., The Heat Balance of the North Sea. Tech. rept. Report n. 8. Proudman Oceanographic Laboratory. 1989.

LARGE, W. G.; POND, S. Open ocean momentum flux measurements in moderate to strong winds. *Journal of Physical Oceanography*, 11, p. 324-481, 1981.

LESSER, G. R. *An Approach to Medium-term Coastal Morphological Modelling*. 2009. f.238, Tese PhD (Doutorado) – UNESCO-IHE & Delft Technical University, Delft, 2009.

LIBES, S. M. *Introduction to Marine Biogeochemistry*. New York: John Wiley & Sons, 1992.

LOUCKS, D.P.; VAN BEEK, E. *Water Resources Systems Planning and Management: An Introduction to Methods, Models and Applications*. Studies and Reports in Hydrology series, UNESCO Publishing. Turin: Ages ArtiGrafiche, 2005.

LUNG, W. *Water quality modeling: application to estuaries*. v. III, Florida: CRC Press, 1993.

McCARTHY, J. J.; KAPLAN, W.; NEVINS, J. L. Chesapeake Bay nutrient and plankton dynamics. 2. Sources and sinks of nitrite. *Limnology and Oceanography*, v. 29, p. 84-98, 1984.

MILLAR, S.; MUPPARAPU, P.; BROWN, W. S.; BUB, F. L. Convex Air-Sea Heat Flux Calculations. Technical Report UNH-OPAL-1999-004. Ocean Process Analysis Laboratory. 1999.

MILLERO, F., Thermodynamics of the carbon dioxide system in the oceans. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, v. 59, n. 4, p. 661–677, 1995.

MIRANDA, L. B.; CASTRO, B. M.; KJERFVE, B. *Princípios de oceanografia Física de estuários*. Edusp, p. 411, 2002.

MORAIS, A. *Estimativa de Cargas Poluidoras na Baía de Vitória com Uso de Sistemas de Informações Geográficas e Sensoriamento Remoto*. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2008.

NASCIMENTO, T. F. do; CHACALTANA, J. T. A. Influence of a constriction in hydrodynamic of Canal da Passagem, Vitória-ES, Brazil. 8th International Conference on Coastal and Port Engineering in Developing Countries – COPEDEC, IIT Madras, Chennais, India. 2012.

NASCIMENTO, T. F. *Análise da influência da descarga do Rio Santa Maria da Vitória sobre a propagação da onda de maré e da hidrodinâmica tridimensional da Baía de Vitória*. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2013.

NASCIMENTO, T. F. do; CHACALTANA, J. T. A; PICOLLI, F.P. Análise da Influência do Alargamento de um Estreitamento na Hidrodinâmica do Canal da Passagem, Vitória-ES, Através de Modelagem Numérica. RBRH – *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 18, n. 3, p. 31-39, 2013.

NIXON, S. W. Coastal marine eutrophication: a definition, social causes, and future concerns. *Ophelia*, v. 41, p. 199-219, 1995.

NIXON, S. W.; AMMERMAN, J. W.; ATKINSON, L. P.; BEROUNSKY, V. M.; BILLEN, G.; BOICOURT, W. C.; BOYNTON, W. R.; CHURCH, T. M.; DITORO, D. M.; ELMGREN, R.; GARBER, J. H.; GIBLIN, A. E.; JAHNKE, R. A.; OWENS, N. J. P.; PILSON, M. E. Q.; SEITZINGER, S. P. The fate of nitrogen and phosphorus at land-sea margin of the North Atlantic Ocean. *Biogeochemistry*, v. 35, p. 141-180, 1996.

NIXON, S. W. Prehistoric Nutrient Inputs and Productivity in Narragansett Bay. *Estuaries*, v. 20, n. 2, p. 253-261, 1997.

NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration). PETERSEN, J.; MICHEL J.; ZENGEL, S.; WHITE, M.; LORD, C.; PLANK, C. Environmental sensitivity index guidelines: Version 3.0. Seattle. NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 11, 2002.

O'CONNOR, D. J. Oxygen balance of an estuary. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, v. 86, n. 35-55, 1960.

O'CONNOR, D. J. The temporal and spatial distribution of dissolved oxygen in streams. *Water Resource Research*, v. 3, n. 1, p. 65-79, 1967.

O'CONNOR, D. J.; DOBBINS, W. The mechanism of reaeration in natural streams. ASCE. . *Journal of Sanitary Engineering Division*, v. 82, n. 6, p. 1-30, 1956.

OLIVEIRA, R. J. *Avaliação da qualidade de água da Baía do Espírito Santo no período de 2000 a 2005*. 2006. 60 f., Monografia (Graduação) – Departamento de Ecologia e Recursos Naturais da Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2006.

PEREIRA, R. S. *Processos que regem a qualidade da água da Lagoa dos Patos, segundo o modelo Delft3D*. 2003. 150 f., Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Oceânica, Fundação Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, 2003.

PEREIRA, R. S. Modelos de Qualidade da Água. *Revista Eletrônica de Recursos Hídricos*, v.1, n. 1, p. 37-48, 2004.

PERILLO, G. M. E. Definitions and geomorphologic classification of estuaries, In: *Geomorphology and Sedimentology of Estuaries*. Org. por Perillo, G. M. E, Elsevier, p. 17-46, 1996.

PETERS, H. Spatial and temporal variability of turbulent mixing in an estuary. *Journal of Marine Resource*, v. 57, p. 805-845, 1999.

PETERS, H.; BOKHORST, R. Microstructure observations of turbulent mixing in a partially mixed estuary. I: Dissipation rates, *Journal of Physical Oceanography*, v. 30, p. 1232–1244, 2000.

POKAVANICH, T.; POLIKARPOV, I.; LENNOX, A.; AL-HULAIL, F.; AL-SAID, T.; AL-ENEZI, E.; AL-YAMANI, F.; STOKOZOV, N., AND SHUHAIBAR, B., 2013. Comprehensive investigation of summer hydrodynamic and water quality characteristics of desertic shallow water body: Kuwait Bay. In: International Conference on Coastal Dynamics (Arcachon, France), 7, 2013. *Anais...* p. 1253-1264, 2013.

PRANDTL, L. Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz. Nachrichten von der Akademie der Wissenschaften in Gottingen. Mathematisch-Physikalische Klasse, p. 6-19, 1945.

PRITCHARD, D. W., Estuarine hydrography, *Advances in Geophysics*, 1, p. 243–280, 1952.

PRITCHARD, D. W. A study of the salt balance in a coastal plain estuary. *Journal of Marine Resource*, v. 13, p. 133-144, 1954.

PRITCHARD, D. W. Estuarine Circulation Patterns. *Proc. Amer. Soc. Civil Eng.*, 81: 1-11, 1955.

PRITCHARD, D. W., The dynamic structure of a coastal plain estuary. *Journal of Marine Resource*, v. 15, p. 33-42, 1956.

PRITCHARD, D. W. What is an estuary: physical viewpoint, *Estuaries*. G.H. Lauff, ed., American Association for the Advancement of Science, Publication n. 83, Washington DC, 1967.

RATTRAY, M.; HANSEN, D. V. A similarity solution for the circulation in an estuary. *Journal of Marine Resource*, v. 20, p. 121-133, 1962.

REDFIELD, A. C. On the proportions of organic derivatives in sea water and their

relation to the composition of plankton. In: *James Johnstone Memorial Volume*, ed. Daniel R. J., Liverpool: University Press of Liverpool, p. 172-192, 1934.

RIGO, D., 2001. Levantamento Topo-Batimétrico dos Manguezais e Canais da Baía de Vitória – Relatório Final, FACITEC – PMV, Vitória, Brasil.

RIGO, D. *Análise do escoamento em regiões estuarinas com manguezais – medições e modelagem na Baía de Vitória, ES*. 2004. Tese (Doutorado), Programa de Pós-Graduação da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Engenharia Oceânica, COPPE, Rio de Janeiro, 2004.

RIJN, VAN L. C.; WALSTRA, D. J. R. *Modelling of sand transport in Delft3D*. Delft Hydraulics, 2003.

VAN RIJN, L. C. *A Unified View of Sediment Transport By Currents and Waves, Part 1: Initiation of Motion, Bed Roughness and Bed Load Transport*. p. 1-40, 2007.

SALDANHA, J. C. S. *Análise da influência do rio Santa Maria da Vitória na Baía de Vitória, através da modelagem computacional: uma contribuição ao processo de enquadramento*. 2007. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2007.

SEITZINGER, S. P.; KROEZE, C.; BOUWMAN, A. F.; CARACO, N.; DENTENER, F.; STYLES, R. V. Global Patterns of Dissolved Inorganic and Particulate Nitrogen Inputs to Coastal Systems: Recent Conditions and Future Projections. *Estuaries*, v. 25, n. 4b, p. 640-655, 2002.

SIMON, A. J.; KENT, E. C.; TAYLOR, P. K. The Southampton Oceanography Centre (SOC) Ocean-Atmosphere Heat, Momentum and Freshwater Flux Atlas. Tech. rept. Southampton Oceanography Centre. 1999.

SLAYTON, J. L.; TROVATO, E. R. *Simplified N.O.D. Determination*. Annapolis field Office, Region III. USEPA. PB-297-995, p. 32, 1978.

SLAYTON, J. L.; TROVATO, E. R. *Biochemical Studies of the Potomac Estuary-Summer, 1978*. Annapolis field Office, Region III. USEPA, Annapolis, Maryland. EPA 903/9-79-005, p. 35, 1979.

SMITH S. D., BANKE E. G. Variation of the sea surface drag coefficient with wind speed. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, v. 101, p. 655–673, 1975.

SMITH, S. D.; FAIRALL, C. W.; GEERNAERT, G. L.; HASSE, L. Air-Sea Fluxes: 25 Years of Progress. *Boundary-Layer Meteorology*, 78. 1996.

STELLING, G. S. *On the construction of computational methods for shallow water flow problems*. Tec. Rep. 35, Rijkswaterstaat, 1984.

STELLING, G. S.; S. P. A. DUINMEIJER. A staggered conservative scheme for every Froude number in rapidly varied shallow water flows. *International Journal Numerical Methods in Fluids*, v. 43, p. 1329–1354, 2003.

STELLING, G. S.; LEENDERTSE, J. J. Approximation of convective processes by cyclic AOI methods. In: International Conference on Estuarine and Coastal Modeling, 2, 1992. Florida. *Anais...* Tampa: ASCE, p. 771–782, 1992.

STENSTROM, M. K.; PODUSKA, R. A. The effect of Dissolved Oxygen Concentration on Nitrification. *Water Research.*, v. 14, p. 643-649, 1980.

STERZA, J.; FERNANDES, L. Zooplankton community of the Vitoria Bay estuarine system: Characterization during a three-year study. *Brazilian Journal of Oceanography*, v. 54, p. 95-105, 2006.

STOMMEL, H.; FARMER, H. G. Control of salinity in an estuary by a transition. *Journal of Marine Resource*, v. 12, p. 12-20, 1953.

STREETER, H.; E. PHELPS. Study of the pollution and natural purification of the Ohio river. *Tech. Rep. Bulletin*, n. 146, U.S. Public Health Service, Washington D.C., 1958. Reimpressão.

TREGUER, P., NELSON, D.M.; VANBENNEKOM, A.J.; DEMASTER, D.J.; LEYNAERT, A.; QUEGUINER, B. The Silica Balance in the World Ocean – A Reestimate. *Science*, 268, p. 375-379, 1995.

THOMANN, R. V. Mathematical model for dissolved oxygen. *Journal of the Sanitary*

Engineering Division, v. 89, p. 1-30, 1963.

THOMANN, R. V.; FITZPATRICK, J. J. *Calibration and Verification of a Mathematical Model of the Eutrophication of the Potomac Estuary*. For Department of Environmental Services, Government of the District of Columbia, Washington D.C., 1982.

THOMAS JR., H. A. The pollution load capacity of streams. *Water Sewage Works*, v. 95, p. 409–413, 1948.

TWIGT, D. J. 3D temperature modeling for the South China Sea using remote sensing data. MSc. Thesis report, WL | Delft Hydraulics and Delft University of Technology. 2006.

TURNER, A.; MILLWARD, G. E. 2002. Suspended particles: Their role in estuarine biogeochemical cycles. *Estuarine and Coastal Shelf Science*, v. 55, p. 857-883.

UITTENBOGAARD, R. E.; VOSSEN, B. V. Subgrid-scale model for Quasi-2D turbulence in shallow water. Shallow flows. In: International Symposium, 2003. *Anais...* p. 575-582, 2003.

UNESCO. *Background papers and supporting data on the international equation of state 1980*. Technical Report UNESC, v. 38. 206-330.

VAN CAPPELLEN, P.; INGALL, E. D. 1996. Redox Stabilization of the Atmosphere and Oceans by Phosphorus-Limited Marine Productivity. *Science*, 271, p. 493-496.

VERBOOM, G. K.; SLOB, A. Weakly-reflective boundary conditions for two-dimensional shallow water flow problems. *Advances in Water Resources*. v. 7, p. 0309-1708, 1984.

VERONEZ, P.; BASTOS, A. C.; QUARESMA, V. S. Morfologia e distribuição sedimentar em um sistema estuarino tropical: Baía de Vitória, ES. *Revista Brasileira de Geofísica*, v. 27, n. 4, p. 609-624, 2009.

VIÉGAS, N. J. de F. *Modelagem numérica das marés no litoral do Espírito Santo*. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental,

Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2006.

VON SPERLING, M. *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos*. v. 1, Terceira edição – Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, UFMG, 1996.

VON SPERLING, M. *Wastewater Characteristics, Treatment and Disposal*. Biological Wastewater Treatment series volume 1, IWA Publishing, London, 2007.

WANG, Q.; LI, S.; JIA, P.; QI, C.; DING, F. A Review of Surface Water Quality Models. *The Scientific World Journal*, v. 2013, p. 1-7, 2013.

WILMOTT, J. C. *On the validation of models. Physical Geography*. v. 2, p. 184-194, 1981.

XIE, D. et al.. Modeling the tidal channel morphodynamics in a macro-tidal embayment, Hangzhou Bay, China. *Continental Shelf Research*, v. 29, p. 1757-1767, 2009.

WL | DELFT HYDRAULICS. *Natural reaeration of surface water by the wind*. Tech. Rep. R1318-II, WL | Delft Hydraulics, Delft, The Netherlands. Report on literature study (in Dutch; J.A. van Pagee), 1978.

WL | DELFT HYDRAULICS. *Natural reaeration of surface water*. Literature study R1149, WL | Delft Hydraulics, Delft, The Netherlands. (in Dutch; G.A.L. Delvigne), 1980.

WILMOTT, J. C. *On the validation of models. Physical Geography*. v. 2, p. 184-194, 1981.